



Approches fonctionnelles de la densité pour les systèmes finis appariés

G. Hupin

► To cite this version:

G. Hupin. Approches fonctionnelles de la densité pour les systèmes finis appariés. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université de Caen, 2011. Français. NNT : . tel-00626383

HAL Id: tel-00626383

<https://theses.hal.science/tel-00626383>

Submitted on 26 Sep 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE CAEN BASSE NORMANDIE

U.F.R. de Sciences

ÉCOLE DOCTORALE SIMEM

THÈSE

Présentée par

M. Guillaume HUPIN

soutenue le

6 Septembre 2011

en vue de l'obtention du

DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ de CAEN

Spécialité : Constituants élémentaires et physique théorique

Arrêté du 07 août 2006

Titre : **Approches fonctionnelles de la densité pour les
systèmes finis appariés**

MEMBRES du JURY :

Mr. Michael BENDER	Directeur de recherche	CENBG	(<i>Rapporteur</i>)
Mr. Philippe CHOMAZ	Ingénieur-Chercheur	CEA-Irfu	(<i>Rapporteur</i>)
Mr. George F. BERTSCH	Professeur	University of Washington	
Mme. Francesca GULMINELLI	Professeur	LPC Caen	
Mr. Denis LACROIX	Chargé de recherche	GANIL	(<i>Directeur de Thèse</i>)

UNIVERSITÉ DE CAEN BASSE NORMANDIE

U.F.R. de Sciences

ÉCOLE DOCTORALE SIMEM

T H È S E

Présentée par

M. Guillaume HUPIN

soutenue le

6 Septembre 2011

en vue de l'obtention du

DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ de CAEN

Spécialité : Constituants élémentaires et physique théorique

Arrêté du 07 août 2006

Titre : **Approches fonctionnelles de la densité pour les
systèmes finis appariés**

MEMBRES du JURY :

M. Michael BENDER	Directeur de recherche	CENBG	(<i>Rapporteur</i>)
M. Philippe CHOMAZ	Ingénieur-Chercheur	CEA-Irfu	(<i>Rapporteur</i>)
M. George F. BERTSCH	Professeur	University of Washington	
M. Francesca GULMINELLI	Professeur	LPC Caen	
M. Denis LACROIX	Chargé de recherche	GANIL	(<i>Directeur de Thèse</i>)

Table des matières

1	Préface	1
2	Les théories basées sur la fonctionnelle en densité en physique nucléaire	5
2.0.1	Les différentes corrélations dans les systèmes nucléaires	7
2.0.1.1	L'interaction nucléaire	7
2.0.1.2	Les corrélations	8
2.1	Théorie de la fonctionnelle en densité ou la méthode SR-EDF	10
2.1.1	Système à N-corps, généralités	10
2.1.1.1	Matrices densité et réduction de l'information	10
2.1.1.2	L'approximation de particules indépendantes	12
2.1.1.3	Inclure des corrélations avec la brisure de symétrie	15
2.1.2	Les corrélations d'appariement	16
2.1.2.1	Quasi-particule et vide de quasi-particules	17
2.1.2.2	La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov	19
2.1.2.3	Motivation expérimentale de l'utilisation d'une théorie incluant l'appariement	20
2.1.3	Théorie fonctionnelle de la densité	22
2.1.3.1	Notions sur les théories fonctionnelles en densité	23
2.1.3.2	Construction du SR-EDF, avec le potentiel effectif de Skyrme	26
2.1.3.3	Pouvoir prédictif des théories fonctionnelles : le cas SR-EDF	29
2.2	Le mélange de configurations et la restauration de symétrie : la méthode MR-EDF	34
2.2.1	Généralités	34
2.2.2	Multi-reference energy density functional (MR-EDF)	37
2.2.2.1	Méthode des coordonnées génératrices (cas Hamiltonien)	37
2.2.2.2	Mélange de configurations pour restaurer les bons nombres quantiques	38
2.2.2.3	Mélange de configurations dans la théorie EDF	40
2.3	Conclusion	41
3	La méthode MR-EDF corrigée et son interprétation fonctionnelle	43
3.1	Analyse critique des méthodes MR-EDF	45
3.1.1	Présentation des difficultés dans le cas de la projection sur le bon nombre de par- ticules	45
3.1.2	Solution minimale au problème de divergence et de saut	49
3.1.3	Recombinaison Hamiltonienne et discussion	52

3.2	Interprétation fonctionnelle de la régularisation MR-EDF dans le cas de la restauration du nombre de particules	55
3.2.1	Le cas Hamiltonien	55
3.2.2	Le cas MR-EDF	57
3.3	Vers une théorie fonctionnelle combinant simultanément la brisure et la restauration de symétrie	62
3.3.1	Règles de construction d'une théorie SC-EDF guidée par le cas Hamiltonien	64
3.3.2	Application de la théorie SC-EDF restaurant le nombre quantique de particule à des fonctionnelles ayant une dépendance non entière de la densité	65
3.4	Conclusion	67
4	Principe variationnel sur un état de Bardeen-Cooper-Schrieffer projeté	71
4.1	Généralités	73
4.1.1	Motivation	73
4.1.2	Point de départ de la théorie VAP appliquée au formalisme SC-EDF	76
4.2	Application du principe variationnel	77
4.2.1	Propriétés des états projetés	78
4.2.2	Equations d'Euler-Lagrange du problème	84
4.2.3	Résolution numérique	87
4.3	Résultats	92
4.4	Conclusion	95
5	Construction d'une fonctionnelle de la matrice densité pour l'appariement	97
5.1	Introduction sur les théories fonctionnelles de la matrice densité à un corps	99
5.1.1	De la DFT vers la DMFT	99
5.2	Construction de fonctionnelles DMFT au-delà de la théorie BCS	104
5.2.1	La fonctionnelle BCS	104
5.2.2	Historique de l'utilisation de la DMFT en physique nucléaire	106
5.2.3	Théorie basée sur la transformée de Legendre	108
5.2.4	Les méthodes approchées pour restaurer la symétrie	109
5.3	Proposition d'une nouvelle fonctionnelle pour décrire l'appariement	112
5.4	Conclusion	122
6	Applications de la nouvelle fonctionnelle	125
6.1	Tests de la nouvelle fonctionnelle dans un cas idéal	127
6.1.1	Modèle de l'Hamiltonien de pairing	127

6.1.2	Discussions supplémentaires des applications au modèle de Richardson avec des niveaux équidistants	129
6.1.2.1	Discussion sur l'approximation linéaire qui conduit à la fonctionnelle DMFT (Eq. (5.64))	130
6.1.2.2	Vérification systématique de la matrice densité à un corps	131
6.1.2.3	Développement limité de la fonctionnelle pour une forme simplifiée	132
6.1.3	Applications	133
6.1.3.1	Les systèmes impairs vs pairs	134
6.1.3.2	Limite d'un grand nombre de particules	135
6.1.3.3	Spectres d'énergies à un corps quelconques	137
6.2	Conclusion	138
7	Conclusions	141
	Annexes	144
A	Correspondance avec les travaux de référence de Dietrich	145
A.0.1	Identification des quantités	145
A.0.2	Identification des équations du minimum	145
	Remerciements	157

Préface

Les noyaux sont des objets fascinants. Leur compréhension est tout à fait essentielle pour décrire le monde qui nous entoure et au-delà. Par exemple, leurs propriétés sont fondamentales pour expliquer les phénomènes en astrophysique nucléaire tels que l'abondance des isotopes dans l'univers. La maîtrise des noyaux conduit à de nombreuses applications, notamment dans le domaine de l'énergie et du médical. Ces entités ne sont pas formées de particules élémentaires mais de protons et de neutrons, eux-même composés de quarks. Ainsi, ce sont des systèmes complexes auto-organisés et auto-liés.

Un des buts d'une théorie, en physique nucléaire, est de pouvoir à la fois décrire les propriétés des noyaux sur l'ensemble de la charte nucléaire, ainsi que sous des conditions thermodynamiques différentes et dans des états hors équilibres, par exemple, pour comprendre les phénomènes de fusion et fission. Vient s'ajouter à ces défis le fait qu'un système de particules en interaction auto-organisé soit le lieu de nombreuses corrélations souvent difficiles à traiter. Une approche possible qui permet d'appréhender, dans un cadre microscopique, les noyaux dans leur ensemble et qui a été initialement développée dans les systèmes électroniques, consiste à utiliser une théorie fonctionnelle de la densité pour décrire l'énergie nucléaire et un ensemble restreint d'observables. En physique nucléaire, ces théories prennent le nom de EDF (Energy Density Functional). Dans le cadre de cette thèse, nous utilisons les théories fonctionnelles EDF pour attaquer ces problèmes et plus précisément pour décrire le phénomène de l'appariement. Depuis les années 70, cette approche a permis de décrire avec une très bonne précision les énergies de liaison, le rayon nucléaire, etc. et peut être appliquée, de façon consistante, aussi bien pour calculer les propriétés statiques des noyaux que les propriétés dynamiques ou thermodynamiques.

Dans les approches fonctionnelles modernes, on cherche à décrire explicitement certaines corrélations à l'aide de la méthode basée sur le mélange de configurations, approche dite de multi-références. Cette approche permet de pouvoir séparer les différents types de corrélations contribuant à l'énergie totale et de décrire un ensemble de configurations possibles dans un espace collectif d'intérêt. Ce dernier point est important dans le cadre de la physique des transitions de phases quantiques^[1]. Par exemple, les noyaux peuvent évoluer d'une forme sphérique à une forme déformée lorsqu'on explore

la charte nucléaire. Ceci correspond à l'émergence d'une brisure spontanée de symétrie. Il est alors nécessaire que la description théorique puisse s'accommoder des brisures spontanées de symétrie tout en prenant en compte les fluctuations associées à ces dernières. Dans ces approches multi-références, l'état intrinsèque (par exemple, un état déformé) permet de reconstruire l'état nucléaire et de calculer la spectroscopie dans un espace collectif particulier. Alors, la description de l'énergie est globalement améliorée[2]. Toutefois, pour pouvoir décrire les dépendances de l'énergie en fonction des variables collectives traitées, cette technique est basée sur la généralisation au cadre fonctionnel de la méthode de la coordonnée génératrice[3]. Des travaux récents[4, 5] ont toutefois montré que cette combinaison pose problème si elle n'est pas appliquée avec précaution.

Ces travaux soulèvent de nombreuses questions à propos du mélange de configurations appliqué aux théories fonctionnelles.

1. Que signifie la notion de restauration de symétrie dans une théorie fonctionnelle[6] ?
2. Peut-on comprendre les calculs de multi-configurations en terme de théorie fonctionnelle basée sur un état auxiliaire ?
3. Est-il possible d'utiliser des dépendances en densité non entières dans le mélange de configurations[7] ?

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à donner des éléments de réponse dans le cas de la description des corrélations d'appariement dans les systèmes finis en utilisant des théories fonctionnelles. Une telle description est tout particulièrement utile dans les petits supraconducteurs[8] et les noyaux où le nombre de particules n'excède pas 400. En physique nucléaire, l'appariement est souvent décrit à l'aide de théories brisant la conservation du nombre de nucléons. De nouveau, les corrélations associées à cette symétrie ne sont correctement prises en compte que si les fluctuations associées à cette brisure de symétrie sont traitées en projetant sur l'espace de Fock de bon nombre de particules. Avec les méthodes de multi-références, il est possible de restaurer cette symétrie. Dans la suite, nous allons présenter des applications de la méthode EDF avec la restauration de la conservation du nombre de nucléons ainsi que des approches alternatives permettant, en particulier, de retrouver la limite de faible appariement et/ou de petit nombre de particules. Nous proposons deux philosophies différentes, la première suit l'idée des méthodes de multi-références en partant d'un état auxiliaire amélioré où les symétries sont correctement prises en compte, la seconde est une approche purement fonctionnelle pour obtenir les dépendances de l'énergie en terme des degrés de liberté à un corps.

Dans ce mémoire, les concepts clés des théories Hamiltoniennes sur lesquelles sont basées les

méthodes fonctionnelles sont développés. La description habituelle, dans le cadre des théories EDF, de l'appariement à l'aide des vides de quasi-particules est présentée et analysée. Nous illustrons les théories fonctionnelles EDF à l'aide de la force de portée nulle de Skyrme. Les avantages et les inconvénients de la description fonctionnelle sont présentés ainsi que ceux de l'utilisation des brisures spontanées de symétrie. Enfin, la méthode de la coordonnée génératrice est présentée de même que son équivalente, la méthode multi-références, dans le cadre des théories fonctionnelles.

Les problèmes associés à l'utilisation simultanée des théories fonctionnelles et du mélange de configurations sont présentés dans le cas modèle d'une fonctionnelle bilinéaire sans dépendance en densité. Pour pouvoir utiliser la méthode MR-EDF, il est nécessaire non seulement de contraindre la forme de l'énergie fonctionnelle en supprimant les dépendances non entières de la densité, mais aussi d'utiliser la méthode de régularisation proposée dans la référence [5]. Une analyse fine est faite de la régularisation. Nous montrons que le mélange de configurations revient à une théorie fonctionnelle des densités de l'état projeté et de l'état sous-jacent. Une simple modification de la régularisation permet de retrouver le cadre d'une fonctionnelle de l'état projeté. Cet état est alors un état de référence décrivant les corrélations associées à la restauration du nombre de particules. Cela nous permet de définir une nouvelle approche que nous appelons Symmetry Conserved-EDF puisque l'état de l'auxiliaire utilisé pour construire les dépendances de l'énergie brise puis restaure la symétrie. Nous l'avons appliquée pour reproduire les résultats régularisés du mélange de configurations. Par construction, l'approche SC-EDF peut être utilisée avec des interactions effectives qui contiennent des puissances non entières de la densité. Nous l'avons testée dans le cas d'une force de portée nulle de Skyrme de type SLy4 possédant de telles dépendances et avons montré que l'énergie était parfaitement régulière.

Cette nouvelle théorie fonctionnelle peut alors être utilisée dans un principe variationnel pour corriger les effets de seuil associés à l'utilisation d'un vide de quasi-particules. En effet, dans ce dernier cas, lorsque la force de l'appariement est trop faible, les corrélations sont nulles et on retrouve une théorie sans appariement. Nous montrons qu'il est possible d'exprimer les densités de l'état projeté en fonction de ses probabilités d'occupation et de celles de l'état sous-jacent. Cela nous permet de dériver le principe variationnel auto-consistant par rapport aux probabilités d'occupation de l'état sous-jacent et aux états à un corps. Enfin, nous proposons une méthode numérique permettant de résoudre les conditions du minimum à l'aide d'une approximation. Les résultats préliminaires montrent que les effets de seuil sont corrigés au niveau des noyaux magiques.

Nous avons également exploré une approche différente, issue de l'extension des théorèmes fonctionnels de Hohenberg et Kohn[9] due à Gilbert[10]. Dans la théorie de la fonctionnelle de la matrice

densité à un corps, l'énergie est une fonctionnelle de la densité à un corps non locale ou, de manière alternative, une fonctionnelle des états propres de la densité à un corps et des probabilités d'occupation. Par exemple, l'énergie dérivée à partir d'un vide de quasi-particules BCS appartient à ce type de fonctionnelle. Considérant les récents développements sur le sujet en matière condensée [11, 12], nous avons généralisé la théorie BCS pour décrire l'énergie d'appariement en prenant en compte les effets de taille finie. Cette nouvelle fonctionnelle a notamment l'avantage d'être valide à faible couplage, là où BCS échoue.

Cette fonctionnelle est testée dans le cadre du Hamiltonien de Richardson[13]. Ce modèle est adapté pour tester les théories traitant les corrélations d'appariement car il peut être résolu exactement. Nous montrons que, quels que soient les paramètres du modèle utilisés, la fonctionnelle reproduit efficacement l'énergie exacte et les problèmes de seuil de BCS sont corrigés. Nous vérifions qu'elle est applicable pour des systèmes de grandes dimensions, jusqu'à 400 particules, qu'avec une légère modification il est possible de décrire les systèmes impairs et que ces conclusions sont vérifiées dans le cas de spectre en énergie à un corps quelconque. Ce dernier point nous permet de conclure qu'elle est tout à fait utilisable dans un cas réaliste en physique nucléaire.

Les théories basées sur la fonctionnelle en densité en physique nucléaire

Résumé :

Dans ce chapitre, nous rappelons la stratégie qui est utilisée afin de décrire le noyau avec une théorie fonctionnelle de la densité. Les théories fonctionnelles ont été introduites en physique nucléaire afin de décrire de façon globale les noyaux. Ces théories autorisant la brisure et la restauration des symétries permettent de décrire les corrélations liées aux transitions de phases quantiques dans les noyaux. Le traitement des corrélations d'appariement est présenté dans le cadre Hamiltonien ainsi que la brisure de symétrie puis leurs extensions au cadre fonctionnel dans respectivement les théories utilisant un seul état de référence ou plusieurs états de référence. Des applications de ces dernières sont illustrées afin de montrer l'efficacité des approches résumées ci-dessous.

Sommaire

2.0.1	Les différentes corrélations dans les systèmes nucléaires	7
2.0.1.1	L'interaction nucléaire	7
2.0.1.2	Les corrélations	8
2.1	Théorie de la fonctionnelle en densité ou la méthode SR-EDF	10
2.1.1	Système à N-corps, généralités	10
2.1.1.1	Matrices densité et réduction de l'information	10
2.1.1.2	L'approximation de particules indépendantes	12
2.1.1.3	Inclure des corrélations avec la brisure de symétrie	15
2.1.2	Les corrélations d'appariement	16

2.1.2.1	Quasi-particule et vide de quasi-particules	17
2.1.2.2	La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov	19
2.1.2.3	Motivation expérimentale de l'utilisation d'une théorie incluant l'appariement	20
2.1.3	Théorie fonctionnelle de la densité	22
2.1.3.1	Notions sur les théories fonctionnelles en densité	23
2.1.3.2	Construction du SR-EDF, avec le potentiel effectif de Skyrme	26
2.1.3.3	Pouvoir prédictif des théories fonctionnelles : le cas SR-EDF	29
	Introduction des calculs sous contraintes	31
	Brisure de symétrie en physique nucléaire et dans la méthode SR-EDF	32
2.2	Le mélange de configurations et la restauration de symétrie : la méthode MR-EDF	34
2.2.1	Généralités	34
2.2.2	Multi-reference energy density functional (MR-EDF)	37
2.2.2.1	Méthode des coordonnées génératrices (cas Hamiltonien)	37
2.2.2.2	Mélange de configurations pour restaurer les bons nombres quantiques	38
2.2.2.3	Mélange de configurations dans la théorie EDF	40
2.3	Conclusion	41

2.0.1 Les différentes corrélations dans les systèmes nucléaires

Les nucléons à l'intérieur du noyau interagissent fortement. Une preuve directe du rôle de l'interaction nucléaire est que l'énergie d'un système composé de nucléons est différente de la somme des énergies de chaque nucléon pris séparément. Ainsi, la masse du deuton, le seul élément binaire lié, est égale à 2.013 uma, alors que les masses du proton et du neutron sont égales respectivement à 1,007 uma et à 1,008 uma. De manière générale, le défaut d'énergie, l'énergie de liaison, d'un noyau composé de A nucléons vaut $E/A \approx 8$ MeV ou $\approx 0,008$ uma. Du fait de l'interaction forte, on s'attend à ce que les nucléons à l'intérieur du noyau soient fortement corrélés. La compréhension de ces corrélations est particulièrement subtile car les systèmes nucléaires se classent parmi les systèmes quantiques fermioniques à N-corps les plus compliqués. Cette complexité fait aussi la richesse des noyaux en terme de phénomènes physiques pouvant s'y produire. Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser plus particulièrement aux corrélations entre nucléons et à leur description dans le cadre des théories fonctionnelles en densité.

2.0.1.1 L'interaction nucléaire

L'interaction entre nucléons est particulièrement complexe. Elle dépend fortement du spin, de l'isospin, du moment angulaire et présente parfois un caractère dit de cœur dur - c'est-à-dire une forte répulsion lorsque la distance inter-nucléons est faible. Par exemple, la figure 2.1 illustre la dépendance de l'interaction dans le canal 1S_0 en fonction de la distance relative r (fm) entre deux nucléons pour les potentiels CDBonn[14] (ligne pointillée court verte), Reid93[15] (ligne pointillée long bleu) et AV18[16] (ligne continue rouge) qui sont des interactions paramétrisées, ajustées aux données nucléaires expérimentales. On voit sur cette figure une forte répulsion à courte portée et un caractère attractif à moyenne et longue portée. La compréhension de l'interaction nucléaire est possible grâce à la chromodynamique quantique (QCD). Par exemple, sa composante de longue portée provient de l'échange d'un pion et son caractère attractif correspond à l'échange de différents mésons représentés sur la figure ci-contre (2π ,

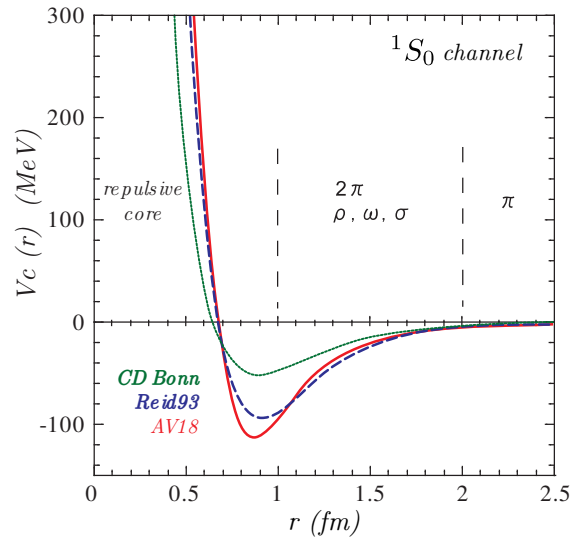


FIG. 2.1: Sur cette figure, trois exemples de potentiels nucléons-nucléons dans le canal 1S_0 entre deux nucléons sont tracés en fonction de la distance relative inter-nucléons r (fm). Les courbes correspondent aux interactions CDBonn[14] (ligne pointillée court verte), Reid93[15] (ligne pointillée long bleu) et AV18[16] (ligne continue rouge). Cette figure est adaptée de la référence [17].

ρ, ω, σ).

Afin de comprendre le noyau et comment les nucléons se lient entre eux, il faut a priori partir du Hamiltonien nucléaire et faire des approches dites ab-initio. Jusqu'à récemment, cette stratégie était très ardue, en particulier à cause du cœur dur. Toutefois, l'arrivée de nouvelles méthodes UCOM[18], SRG[19, 20] et autres, a ouvert de nouvelles possibilités dans ce domaine[21]. Ces approches illustrent, en particulier, que la compréhension des phénomènes nucléaires de basse énergie peut se faire avec des interactions dites "douces" (sans cœur dur). Cependant, leur utilisation est pour l'instant limitée à peu de noyaux (légers et/ou doublement magiques).

En parallèle, un certain nombre d'approches plus phénoménologiques ont été développées telles que le modèle en couche ou la méthode de la fonctionnelle en densité (EDF en physique nucléaire). Cette dernière est la seule approche microscopique qui permet d'appréhender l'ensemble de la carte des noyaux. La théorie de la fonctionnelle en densité, qui est décrite plus en détail dans ce chapitre, utilise le plus souvent la notion d'interaction effective ou de potentiel effectif. La justification de ces approches ne peut se faire qu'en prenant en compte que l'interaction entre deux nucléons dans le milieu nucléaire est très différente de celle entre deux nucléons isolés. On parle alors d'effet de milieu[22, 23]. Il permet en particulier de comprendre pourquoi, malgré que les nucléons soient en interaction forte, il peut être supposé avec une très bonne approximation, que les nucléons se comportent comme des particules indépendantes dans un champ effectif à un corps. Cette constatation est le point de départ des méthodes EDF basées sur les interactions effectives de type Skyrme[24] ou Gogny[25].

2.0.1.2 Les corrélations

Afin de décrire les propriétés des noyaux, il faut traiter les corrélations qui sont d'origines variées et induites par la complexité de l'interaction nucléaire. En général, on en distingue trois types[26],

- Les corrélations de courte portée qui sont créées par le cœur dur, répulsif, de l'interaction nucléaire (figure 2.1). C'est de loin la contribution dominante qui doit être traitée dans les méthodes ab-initio.
- Les corrélations de longue portée sont à l'origine des résonances géantes qui se développent à des énergies d'excitation élevées ($\approx 10 - 20$ MeV [27]).

⇒ Dans les méthodes EDF, ces deux types de corrélation sont décrites à l'aide d'une interaction effective, l'énergie est alors une fonctionnelle de la densité nucléaire. Alors, ces corrélations sont a priori incluses dans les dépendances en densités et en courants de l'énergie et sont traitées comme des effets d'inhomogénéité de la matière nucléaire.

- Les corrélations de basses énergies et corrélations collectives sont reliées à la forme et à la taille des noyaux. Contrairement aux corrélations de courte et longue portée qui agissent de la même façon sur toute la charte nucléaire jusque dans la matière nucléaire infinie, ces corrélations sont

très dépendantes des effets de couche et donc du noyau considéré. Par exemple, les corrélations collectives sont associées aux observations de brisure spontanée de symétrie, des changements de forme du noyau[28] dans le repère qui lui est propre (repère intrinsèque), et sont nécessaires pour décrire la spectroscopie de basse énergie. Cette forte dépendance en fonction du nombre de neutrons et de protons nécessite une description plus élaborée dans la théorie fonctionnelle. Une ou plusieurs variables collectives sont généralement représentatives du changement de forme. En physique nucléaire, on traite le plus souvent les fluctuations quadrupolaires voire octupolaires. De plus, le noyau doit, dans le repère du laboratoire, respecter certaines symétries telles que la symétrie de translation, de rotation, de parité et de rotation dans le plan complexe. Ces dernières contribuent à la description des états de basse énergie.

La méthode utilisée pour décrire les noyaux dans les théories EDF consiste à séparer en deux étapes l'inclusion des corrélations[6]. La première étape permet de décrire un ensemble de systèmes de référence qui sont définis par rapport à une ou plusieurs variables collectives correspondantes aux degrés de liberté importants, souvent repérés par l'expérience. Dans cette étape, dite de champ moyen, l'état du système est décrit pour chaque valeur des degrés de liberté collectifs (i) par un seul état dit de particules indépendantes (déterminant de Slater[29]) ou par un vide de quasi-particules et (ii) par une interaction effective. Elle permet de décrire au moins les effets de milieu présent le long de la charte nucléaire, soit la contribution majoritaire de l'énergie de liaison nucléaire. C'est l'étape dite de simple référence (SR-EDF pour "single reference EDF"). Dans un second temps, les corrélations résiduelles, la partie de l'énergie de liaison très fluctuante en fonction du nombre de nucléons $\approx 2 - 20$ MeV, sont traitées à l'aide du mélange de configurations qui construit l'état nucléaire comme une superposition d'états obtenus au niveau SR-EDF. Cette étape est essentielle pour décrire correctement l'état intrinsèque du noyau et, en particulier, les corrélations collectives associées aux changements de phase qui se manifestent dans le repère intrinsèque. Les corrélations résiduelles prises en compte dans cette étape sont les corrélations induites par les symétries nucléaires traitées par projection (parité, rotation, nombre de particules) et les fluctuations des variables collectives (quadrupolaire, octupolaire...). C'est l'étape de multi-référence (MR-EDF pour "multi-reference EDF").

Nous allons décrire dans un premier temps la méthode SR-EDF. C'est une première approximation du problème à N-nucléons, elle incorpore déjà certaines corrélations nécessaires pour décrire correctement le noyau. Par exemple, l'état simple référence traite les corrélations de courte et longue portée grâce à l'interaction effective, mais aussi les effets de paires dans les noyaux à l'aide d'une description de quasi-particule. Le contexte théorique dans lequel nous travaillerons, en particulier la théorie de la fonctionnelle en densité, est précisé. Puis, la méthode de la coordonnée génératrice ainsi que son utilisation avec une théorie fonctionnelle (MR-EDF) est expliquée.

2.1 Théorie de la fonctionnelle en densité ou la méthode SR-EDF

2.1.1 Système à N-corps, généralités

Pour décrire un système quantique de N particules en interaction, on peut décomposer son état quantique dans l'espace de Fock à N-corps,

$$|\Psi^N\rangle = \sum_{i_1 \dots i_N} f(i_1 \dots, i_N) |i_1, \dots, i_N\rangle, \quad (2.1)$$

où les états i sont des états à un corps associés à une base $\{\phi_i\}$ et $|i_1, \dots, i_N\rangle$ est un état de Fock antisymétrisé. Dans une base complète d'états à un corps, l'Hamiltonien à N corps s'écrit, en fonction des opérateurs de création et d'annihilation (respectivement a_i^\dagger et a_i associés à ϕ_i et ϕ_i^*),

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{(2!)^2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l + \dots, \quad (2.2)$$

où le premier terme correspond à l'énergie cinétique et où les éléments de matrice de l'interaction à deux corps $\bar{v}_{ijkl} = \langle \phi_i \phi_j | \bar{v} (|\phi_k \phi_l\rangle - |\phi_l \phi_k\rangle) \rangle$ ont été antisymétrisés. L'état du fondamental est obtenu en résolvant l'équation de Schrödinger $\hat{H} |\Psi^N\rangle = E_0 |\Psi^N\rangle$, où E_0 est la valeur propre minimum de l'Hamiltonien et correspond à l'énergie de l'état fondamental. Il est strictement équivalent de résoudre le problème par une équation aux variations

$$\delta \left(\langle \Psi^N | \hat{H} | \Psi^N \rangle - E \langle \Psi^N | \Psi^N \rangle \right) = 0, \quad (2.3)$$

où la variation se fait par rapport à tous les degrés de liberté des états Ψ^N (Eq. 2.1) et E est un paramètre de Lagrange qui impose l'orthonormalité de l'état Ψ^N . C'est le principe variationnel de Rayleigh-Ritz[30, 31].

En pratique, il n'est que très rarement possible de satisfaire la variation par rapport à tous les degrés de liberté, c'est pourquoi, le plus souvent, l'état Ψ^N est restreint à une classe spécifique d'états telle que des déterminants de Slater ou des états de vide de quasi-particules. On appelle alors Ψ^N une fonction d'onde d'essai que le principe variationnel optimise pour satisfaire un minimum d'énergie et ainsi obtenir la meilleure approximation de l'état fondamental. Cela nous assure aussi que l'énergie E associée à l'état d'essai qui est obtenu en appliquant le principe variationnel, est supérieure ou égale à E_0 .

2.1.1.1 Matrices densité et réduction de l'information

En général, il est très difficile de résoudre le problème quantique à N corps exactement. En effet, l'information contenue dans l'état quantique Ψ^N est proportionnelle à ses très nombreux degrés de liberté, or, le plus souvent, on s'intéresse à des degrés de liberté spécifiques liés aux observations expérimentales. Ainsi, on classe généralement les observables en fonction de leur complexité : un corps, deux

corps etc... En seconde quantification, ces observables s'écrivent

$$\begin{aligned}\hat{O}^1 &= \sum_{i_1 i_2} O_{i_1 i_2} a_{i_1}^\dagger a_{i_2} & K=1, \\ \hat{O}^2 &= \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4} O_{i_1 i_2 i_3 i_4} a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger a_{i_3} a_{i_4} & K=2, \\ &\dots\end{aligned}$$

On en déduit que la valeur moyenne d'une observable à K-corps est donnée par $\langle \hat{O}^K \rangle = Tr \hat{O}^K \hat{\rho}^K$, où

$$\hat{\rho}_{i_2 K \dots i_1}^K = \frac{\langle \Psi^N | a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_{2K}} | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle}, \quad (2.4)$$

définit les éléments de la matrice densité à K corps du système. Ainsi, il n'est pas nécessaire de connaître la densité totale du système, $D^N = |\Psi^N\rangle\langle\Psi^N|$, pour prédire la valeur moyenne d'une classe d'observables à $K < N$ corps. L'équation ci-dessus montre que la densité réduite $\hat{\rho}^K$ est suffisante. Par exemple, en physique nucléaire, les observables expérimentales sont majoritairement des observables à un corps telles que le rayon nucléaire, la forme du noyau, etc. Donc, une théorie capable de prédire la densité à un corps,

$$\rho_{ji}^1 = \frac{\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_j | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle}, \quad (2.5)$$

est suffisante pour décrire ce type d'observables expérimentales. Les densités réduites contiennent moins d'information que la densité totale du système, on parle alors de réduction d'information. Par exemple, la relation de réduction des densités ¹

$$\hat{\rho}^1 = \frac{N!}{(N-1)!} Tr_{2\dots N} \hat{D}^N, \quad (2.6)$$

où $Tr_{2\dots N}$ est la trace partielle appliquée aux particules 2 à N , montre qu'elles sont entièrement déterminées par l'état Ψ^N , on a $\Psi^N \rightarrow \hat{\rho}^K$. A priori, il est plus simple de travailler avec les densités réduites car elles contiennent moins d'information. Nous verrons que c'est une des motivations pour utiliser des théories fonctionnelles telle que la méthode EDF.

Dans l'introduction, nous avons discuté la notion de corrélations, du point de vue du problème à N-corps, elles sont définies de manière unique selon leurs complexités. Par exemple, la matrice de corrélation à deux corps d'un système quantique, notée \hat{C}^2 , est définie par

$$\rho_{lkji}^2 = \rho_{li}^1 \rho_{kj}^1 - \rho_{ki}^1 \rho_{lj}^1 + C_{lkji}^2, \quad (2.7)$$

où le premier membre de droite de l'équation correspond à la contribution de particules indépendantes que nous détaillerons ci-dessous. Puisque les systèmes nucléaires sont corrélés, leurs propriétés à un

¹Ici, on utilise les densités qui par construction vérifient $Tr \hat{\rho}^1 = N$

corps sont influencées par des effets à deux corps. Prenons par exemple la matrice densité à un corps, celle-ci peut être obtenue en réduisant l'information contenue dans la densité à deux corps (Eq. 2.7), alors

$$\hat{\rho}^1 = \frac{1}{N-1} Tr_2 \hat{\rho}^2. \quad (2.8)$$

En reportant ce résultat dans l'Eq. (2.7), on en déduit la relation

$$(\hat{\rho}^1)^2 - \hat{\rho}^1 = Tr_2 \hat{C}^2, \quad (2.9)$$

où nous avons utilisé le résultat $Tr \hat{\rho}^1 = N$ qui correspond à la condition que doit respecter un système composé de N particules. De façon similaire, les conditions suivantes doivent être vérifiées $Tr \hat{\rho}^2 = N(N-1) \dots$. Ainsi, on voit dans l'équation ci-dessus que si $\hat{C}^2 \neq 0$ alors $(\hat{\rho}^1)^2 \neq \hat{\rho}^1$. Ainsi, dans la base canonique de $\hat{\rho}^1$, la base où $\hat{\rho}^1$ est diagonale, ses valeurs propres n_i qui doivent vérifier $0 < n_i < 1$ (fermions) et qui correspondent aux nombres d'occupation des particules sur les orbitales, se distribuent entre 0 et 1 en fonction de \hat{C}^2 . A l'opposé si $\hat{C}^2 = 0$, alors

- Puisque $(\hat{\rho}^1)^2 = \hat{\rho}^1$, on en déduit que les nombres d'occupation sont égaux à 1 ou 0. Cela correspond au cas où l'état à N-corps est un déterminant de Slater.
- Alors $\hat{\rho}^2$ (et plus généralement $\hat{\rho}^K$) est une fonction de $\hat{\rho}^1$. On dit que toute l'information est contenue dans les degrés de liberté à un corps (réduction de l'information).
- Cette limite correspond à la limite de particules indépendantes qui est développée ci-après.

2.1.1.2 L'approximation de particules indépendantes

L'approximation de particules indépendantes, appelée aussi méthode Hartree-Fock (HF) utilise comme fonction d'onde d'essai un déterminant de Slater

$$|\Psi^N\rangle = \prod_{i=1}^N c_i^\dagger |-\rangle = |1 \dots N\rangle, \quad (2.10)$$

où les opérateurs de création c_i^\dagger correspondent à une base d'états à un corps et $|-\rangle$ est un vide de particule. Dans la méthode HF, toute l'information est contenue dans la densité à un corps $\hat{\rho}^1$ tandis que les matrices de corrélations à 2, \dots , N corps sont égales à zéro. Les densités s'expriment par

$$\hat{\rho}^K = \hat{A} \left\{ \prod_k^K \hat{\rho}_k^1 \right\}, \quad (2.11)$$

où \hat{A} est l'opérateur d'antisymétrisation. Le principe variationnel (Eq. 2.3) permet de minimiser l'énergie en optimisant les degrés de liberté à un corps. L'énergie d'un système décrit par un état de Slater Ψ^N ,

s'écrit

$$\frac{\langle \Psi^N | \hat{H} | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle} = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^1 + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{li}^1 \rho_{kj}^1 . \quad (2.12)$$

Pour s'attaquer à la minimisation du principe variationnel, on a deux choix possibles, (i) soit on fait varier les composantes de ρ_{li}^1 en imposant $(\hat{\rho}^1)^2 = \hat{\rho}^1$ cela revient à faire varier les contributions de particule-trou de $\hat{\rho}^1$. Alors on obtient la condition suivante

$$0 = [\hat{\mathcal{H}}[\hat{\rho}^1], \hat{\rho}^1] , \quad (2.13)$$

où $\hat{\mathcal{H}}[\hat{\rho}^1]$ est appelé l'Hamiltonien de champ moyen et s'écrit comme $\mathcal{H}_{il} = t_{il} + \sum_{jk} \bar{v}_{ijkl} \rho_{kj}$, (ii) soit on décompose $\hat{\rho}^1$ sur une base d'état à un corps $\{\phi_i\}$, c'est-à-dire en posant

$$\hat{\rho}^1 = \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| , \quad (2.14)$$

alors on fait varier directement les composantes ϕ_i^* ou ϕ_i . Dans ce dernier cas, il est nécessaire d'imposer l'orthonormalité des états à un corps lors de la minimisation. Ainsi la condition d'optimum de l'énergie s'écrit

$$\delta \left(\langle \Psi^N | \hat{H} | \Psi^N \rangle - E \langle \Psi^N | \Psi^N \rangle - \sum_{ij} \varepsilon_{ij} (\langle \phi_i | \phi_j \rangle - \delta_{ij}) \right) = 0 , \quad (2.15)$$

où les ε_{ij} sont des paramètres de Lagrange et donc, dans le cas $i = j$, les multiplicateurs de Lagrange s'identifient aux énergies des états à un corps. Les variations sont faites par rapport aux états à un corps ϕ_i^* (et de façon équivalente par rapport à ϕ_i). Les nouvelles contraintes imposent de travailler dans la base canonique de $\hat{\rho}^1$.

On trouve que les états à un corps vérifient une équation aux valeurs propres $\hat{\mathcal{H}}[\hat{\rho}^1] |\phi_i\rangle = \varepsilon_{ii} |\phi_i\rangle$. Ainsi, dans l'approche Hartree-Fock, la condition d'optimalité est vérifiée lorsque la densité à un corps est diagonale en même temps que l'Hamiltonien de champ moyen du problème. Ce dernier possède des propriétés particulières. Par exemple, le champ moyen est auto-cohérent, cela simplifie sa résolution. Il peut être obtenu numériquement par une solution itérative qui converge vers la forme diagonale de $\hat{\mathcal{H}}[\hat{\rho}^1]$. En pratique, on peut utiliser une méthode de propagation en temps imaginaire[32] pour le rendre diagonal et sélectionner ses valeurs propres les plus faibles correspondant aux énergies à un corps ε_i des états occupés ($n_i = 1$).

De plus, il est souvent interprété comme un champ effectif car il contient toute l'information nécessaire pour construire $\hat{\rho}^1$ puisqu'on a l'enchaînement de dépendance suivant

$$\hat{\rho}^1 \longrightarrow \hat{\mathcal{H}}[\hat{\rho}^1] \longrightarrow \mathcal{E}[\hat{\rho}^1] , \quad (2.16)$$

où le sens des flèches indique que la quantité à droite est uniquement déterminée par celle(s) de gauche. Il est important de remarquer que l'état de particules indépendantes peut ne pas avoir les bons nombres

quantiques associés aux symétries du système à N-corps. Ainsi, l'Hamiltonien de champ moyen n'aura pas non plus les bonnes symétries du fait de sa dépendance de la densité $\hat{\rho}^1$, construite à partir de l'état de Slater Ψ^N . On parle alors de brisure de symétries, ce qui se révèle être un outil puissant permettant d'obtenir un système plus lié plus facilement qu'avec une théorie respectant les symétries du problème du début à la fin. En pratique, la méthode de champ moyen peut être utilisée en brisant des symétries et quand elle est combinée avec les multiplicateurs de Lagrange adéquats, elle permet de décrire l'espace des phases du repère intrinsèque, le repère attaché au noyau où les symétries du laboratoire ne sont pas forcément respectées.

Toutefois en négligeant les corrélations à deux corps, l'approximation Hartree-Fock ne permet pas toujours de décrire précisément les observables à un corps (cf section 2.1.1.1). En effet, ces dernières sont influencées par toutes les corrélations du problème (cf. Eq. 2.7). La façon la plus simple de le voir est d'écrire la densité $\hat{\rho}^1$ dans sa base canonique où la présence de corrélations conduit, comme nous avons vu précédemment, à l'expression

$$\hat{\rho}^1 = \sum_i n_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|, \quad (2.17)$$

où n_i correspond à la probabilité d'occupation de l'orbitale ϕ_i . Avec une approximation de particule indépendante on a $n_i = 0$ ou 1, alors que l'effet des corrélations conduit à des nombres d'occupation différents de 0 et 1 (cf. Eq. 2.7). Il est essentiel de traiter l'effet des corrélations sur la matrice densité à un corps pour pouvoir prédire toutes les observables associées. Ainsi, quelle que soit la théorie, l'information sur ces dernières n'est complète que si les orbitales et les nombres d'occupation sont correctement approchés. Comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, c'est le point de départ des théories fonctionnelles basées sur la matrice densité à un corps (DMFT).

En ce qui concerne les états excités (et la spectroscopie) prédits dans le cadre de la théorie Hartree-Fock, les excitations qui leurs sont associées, sont de type particule-trou,

$$a_{p>i_F}^\dagger \prod_{j \neq hole}^{i_F} a_j^\dagger |-\rangle, \text{ ou } 2p2h, \text{ ou } 3p3h... \quad (2.18)$$

où i_F représente le dernier état occupé de la mer de Fermi. L'excitation de type particule-trou ou ph peuple un état vide (p) au-dessus de l'énergie de Fermi en dépeuplant un état dans la mer de Fermi (h). L'énergie d'un état excité de cette façon correspond à la différence des énergies à 1-corps entre le trou et la particule. Cependant, les états excités HF n'expliquent qu'une partie de la spectroscopie de base énergie. En particulier, ils ne permettent pas de rendre compte de l'appariement qui nécessite d'inclure des corrélations spécifiques. Nous allons voir par la suite que la notion d'état de particule indépendante peut être généralisée de sorte à traiter partiellement ces corrélations.

2.1.1.3 Inclure des corrélations avec la brisure de symétrie

Il est possible d'introduire des corrélations au-delà de HF sans relâcher la possibilité de décrire des états de particule indépendante. Cela se fait au prix de briser certaines symétries. On va illustrer cette idée en généralisant les états Hartree-Fock. Considérons l'état suivant

$$|\Psi\rangle = e^{\sum_i x_i c_i^\dagger + \sum_i x_i^* c_i} |-\rangle, \quad (2.19)$$

où les $\{x_i\}$ sont des nombres de Grassman qui vérifient en particulier $x_i^2 = 0$ et $x_i x_j = -x_j x_i$. Ces états sont appelés états cohérents en référence au paquet d'onde de lumière². L'état cohérent est une superposition d'états Hartree-Fock dont le nombre de particules varie de 0 à $+\infty$, et donc, cet état n'est pas un état propre de l'opérateur de nombre de particules $\hat{N} = \sum_i a_i^\dagger a_i$. Ainsi, on peut calculer les fluctuations du nombre de particules

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = \langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2, \quad (2.21)$$

où $\Delta N = \hat{N} - \langle \hat{N} \rangle$. Si l'état Ψ était une valeur propre de \hat{N} , alors $\langle (\Delta N)^2 \rangle = 0$ et plus généralement $\langle (\Delta N)^k \rangle = 0$. Supposons qu'on veuille décrire un système de N particules avec ces états, on peut imposer que le nombre moyen de particules $\langle \hat{N} \rangle$ soit égal à N . Pour cela il faut considérer que l'état (2.19) est une fonction d'essai dans le principe variationnel (Eq. 2.15) avec la contrainte supplémentaire

$$\lambda (Tr \hat{\rho}^1 - N), \quad (2.22)$$

où le paramètre de Lagrange λ est ajouté et est appelé énergie de Fermi. En pratique, cela revient à imposer que $\sum_i x_i^* x_i = N$. Si maintenant on calcule $\langle \hat{N}^2 \rangle$, on voit que les fluctuations du nombre de particules sont non nulles, $\langle (\Delta N)^2 \rangle = N$. Ainsi, bien que cette contrainte impose le bon nombre de nucléons en moyenne, cet état ne respecte pas l'invariance de jauge $\mathcal{U}(1)$ associée au nombre quantique de particules. Contrairement à l'état HF où les probabilités d'occupation des orbitales sont 0 ou 1, l'état cohérent n'est pas pur car $(\hat{\rho}^1)^2 = N \hat{\rho}^1$, alors ses nombres d'occupation sont 0 ou N . Cet exemple permet de souligner le caractère physique de la conservation des symétries mais également de mettre en évidence l'intérêt de les briser. Les états cohérents présentés ici sont aussi appelés états produits. En effet, en utilisant le fait que $(c_i^\dagger)^2 = 0$, on peut les écrire comme

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N} \prod_i (1 + x_i c_i^\dagger) |-\rangle, \quad (2.23)$$

²Ces états sont parfois introduits sous une forme alternative

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N} e^{\sum_i x_i c_i^\dagger} |-\rangle, \quad (2.20)$$

où la condition de normalisation $\mathcal{N} = e^{-\sum_i \frac{x_i^* x_i}{2}}$, fait apparaître leur caractère gaussien.

ce qui simplifie grandement les calculs et qui, si nous développons le produit, nous permet d'obtenir

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle = \mathcal{N} \Big(& |-\rangle & N = 0, \\
 & + \sum_i x_i c_i^\dagger |-\rangle & N = 1, \\
 & + \sum_{i_1 i_2}^{\neq} x_{i_1} x_{i_2} c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger |-\rangle + \dots & N = 2, \\
 & + \sum_{i_1 i_2 i_3}^{\neq} x_{i_1} x_{i_2} x_{i_3} c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger c_{i_3}^\dagger |-\rangle & N = 3, \\
 & \dots \Big)
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

où la notation \neq dans les sommes signifie que les indices sont tous deux à deux différents. On voit dans cette équation que des états de différent nombre de particules N sont mélangés. Toutefois, en imposant $\langle \hat{N} \rangle = N$, la contribution correspondante au nombre quantique de particules désiré est dominante dans le mélange. On remarque que cette composante correspond à

$$\sum_{i_1 \dots i_N}^{\neq} x_{i_1} \dots x_{i_N} a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_N}^\dagger |-\rangle = \sum_{i_1 \dots i_N}^{\neq} x_{i_1} \dots x_{i_N} |i_1 \dots i_N\rangle, \tag{2.25}$$

qui permet de prendre en compte des corrélations au-delà de l'approximation de particule indépendante. Finalement, comme nous le verrons par la suite, l'utilisation de technique de projection permet de sélectionner cette dernière. En effet, nous avons

$$P^N |\Psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_N}^{\neq} x_{i_1} \dots x_{i_N} a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_N}^\dagger |-\rangle, \tag{2.26}$$

où P^N est l'opération de projection sur le bon nombre de particules, ce qui permet de tirer avantage de la brisure de symétrie tout en conservant le nombre de particules. Les états cohérents illustrent la notion d'états brisant la conservation associée à \hat{N} . L'utilisation d'états de quasi-particules est une extension de cette approche qui permet de traiter les corrélations d'appariement.

2.1.2 Les corrélations d'appariement

Nous souhaitons maintenant enrichir la fonction d'onde d'essai. Parmi les corrélations collectives, l'organisation des noyaux comme une superposition de paires de nucléons, l'appariement, peut être décrit au niveau SR-EDF (voir ci-dessous). La nécessité d'introduire le phénomène de l'appariement dans les théories microscopiques est intimement liée aux observations expérimentales. En particulier, il est observé que les noyaux doublement pairs ont un état fondamental de moment total nul (0^+) et un spectre en énergie possédant un "gap" entre le fondamental et le premier état excité. Ce dernier, un

état 2^+ pour les noyaux proches d'une fermeture de couche, ne peut être expliqué ni par une excitation rotationnelle, ni par une excitation de type particule-trou. De plus, la spectroscopie des noyaux impairs ne possède aucun de ces caractères. Étonnement, ils sont moins liés d'à peu près autant que le gap, que leurs homologues pair-pair. Ce genre d'observation a été expliqué par Bohr, Mottelson et Pines[33] en appliquant les méthodes développées dans le cadre de la théorie de la supraconductivité électronique par Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) [34]. En effet, la phase supraconductrice est possible dans les systèmes électroniques car l'appariement des électrons en paire de Cooper fait gagner de l'énergie de liaison au système. Appliqué à la physique nucléaire, l'appariement entre deux nucléons explique le gap observé dans les spectres en énergie des noyaux pair-pair. On comprend qu'une façon d'exciter le noyau est de lui apporter un supplément d'énergie pour briser une paire et promouvoir un des deux nucléons. La différence d'énergie de liaison entre les noyaux pairs et les noyaux impairs s'appréhende de la même façon[3]. On a donc un nouveau mécanisme d'excitation qui consiste à briser une paire.

Il faut maintenant choisir le type de couplage à utiliser pour former les paires. Le fait que le fondamental est un état 0^+ dans les noyaux pair-pair est un indicateur de ce couplage. En effet cela nous montre que les nucléons sont couplés à un spin total zéro. C'est-à-dire que dans une couche l les nucléons préfèrent s'apparier entre états dégénérés de spins opposés σ et $-\sigma$, satisfaisant ainsi automatiquement l'invariance par renversement du temps. On serait arrivé intuitivement à la même conclusion en observant que la superposition maximum des orbites sphériques est atteinte pour des spins opposés. Les paires de Cooper sont alors formées par le couple de particules associé aux créateurs de paires $a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger$, où l'état \bar{i} est l'état renversé en temps de l'état i . Par convention, dans la suite, l'espace est divisé en deux et $\bar{i} = -i$.

2.1.2.1 Quasi-particule et vide de quasi-particules

De même que dans le cas des états cohérents illustrés dans la section précédente, il est possible d'introduire des états basés sur la superposition de paires de particules

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N} e^{\sum_{i>0} x_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger} |-\rangle, \quad (2.27)$$

où le facteur de normalisation est égal à $e^{\sum_{i>0} x_i^2/2}$. Cette fonction d'onde est l'ansatz proposée par Bardeen, Cooper et Schrieffer pour expliquer la supraconductivité électronique. Nous allons utiliser par la suite certaines des propriétés suivantes :

- C'est un état produit $|\Psi\rangle = \mathcal{N} \prod_{i>0} (1 + x_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |-\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |-\rangle$.
- Il est vecteur propre des opérateurs d'annihilation $a_i a_{\bar{i}}$ avec la valeur propre x_i . Si on compare cette dernière propriété à l'approximation de particule indépendante, on remarque que, bien que

l'état HF puisse s'écrire avec des paires $\prod_{i=1}^N a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger$, il ne décrit pas la physique associée à l'appariement.

- L'état donné par l'Eq. (2.27) est écrit dans la base canonique de $\hat{\rho}^1$, ainsi on peut identifier automatiquement les nombres d'occupation $n_i = \langle \Psi | a_i^\dagger a_i | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$.
- L'état n'est pas invariant par rotation dans l'espace de jauge $\mathcal{U}(1)$. En effet, les fluctuations du nombre de particules correspondent dans l'approche BCS à

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = \text{Tr} (\hat{\rho} - \hat{\rho}^2) + \text{Tr} \hat{C}^2 = 2 \text{Tr} \hat{C}^2, \quad (2.28)$$

où cette dernière quantité s'exprime par $\left(\sum_i \sqrt{n_i(1-n_i)} \right)^2 < N$. Ainsi, l'état BCS n'est pas une valeur propre de \hat{N} sauf si les corrélations sont nulles, et dans ce cas on a $n_i = 1$ ou 0 , c'est-à-dire un état de particule indépendante (cf. la discussion de la section ci-avant). On remarque que dans la limite thermodynamique (limite de grand nombre de particules), on a $\sqrt{\langle (\Delta N)^2 \rangle} / N \rightarrow 0$ ce qui indique que la symétrie de jauge est restaurée dans la limite thermodynamique.

- On peut introduire la transformation de Bogoliubov spéciale[35]

$$\begin{aligned} b_i &= u_i a_i + v_i a_{\bar{i}}^\dagger, \\ b_{\bar{i}} &= u_{\bar{i}} a_{\bar{i}} - v_{\bar{i}} a_i^\dagger, \end{aligned} \quad (2.29)$$

où b_i (resp. $b_{\bar{i}}$) est l'opérateur d'annihilation de la quasi-particule (qp) i (resp. \bar{i}). Pour que la transformation soit unitaire on pose

$$x_i = \frac{v_i}{u_i}, \quad (2.30)$$

avec la condition $v_i^2 + u_i^2 = 1$, alors on retrouve $\{b_i, b_j^\dagger\} = \delta_{ij}$. On remarque que l'état BCS s'écrit comme un produit des opérateurs d'annihilation de qp, $|\Psi\rangle = \prod_{i \geq 0} b_i |-\rangle$. Ainsi, il a la particularité d'être un vide de qp dénoté $|-\rangle_{qp}$, muni de la propriété que pour tout k , $b_k |-\rangle_{qp} = 0$.

- La transformation de Bogoliubov se généralise à un changement de base quelconque par $b_i = \sum_k U_{ik} a_k + V_{ik} a_k^\dagger$. C'est la théorie des états de vide de quasi-particules conduisant à l'approche de Hartree, Fock et Bogoliubov (HFB). La fonction d'onde d'essai s'écrit alors,

$$|\Psi\rangle = \mathcal{N} e^{\sum_{ji} x_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger} |-\rangle = \mathcal{N} \hat{D} e^{\sum_{i>0} x_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger} |-\rangle, \quad (2.31)$$

où \hat{D} est une transformation unitaire de la base des états à 1-corps.

- Il est à noter que tout comme l'état de Slater est une base complète de l'espace des fonctions d'onde à N-corps, l'état HFB est une base complète des états de nombre de particules pair. La preuve est similaire à celle des états cohérents[35, 36].

La propriété d'état produit et de vide qp de l'état BCS/HFB simplifie considérablement l'évaluation des observables. En effet, nous pouvons utiliser le théorème de Wick[37] qui exprime la valeur moyenne des éléments des matrices densités à deux corps et plus. Par exemple, la matrice densité à deux corps d'un vide de qp s'écrit

$$\frac{{}_{qp}\langle -|a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l|-\rangle_{qp}}{{}_{qp}\langle -|-\rangle_{qp}} = \frac{\langle a_i^\dagger a_l \rangle}{\langle -|-\rangle} \frac{\langle a_j^\dagger a_k \rangle}{\langle -|-\rangle} - \frac{\langle a_i^\dagger a_k \rangle}{\langle -|-\rangle} \frac{\langle a_j^\dagger a_l \rangle}{\langle -|-\rangle} + \frac{\langle a_i^\dagger a_j^\dagger \rangle}{\langle -|-\rangle} \frac{\langle a_k a_l \rangle}{\langle -|-\rangle}, \quad (2.32)$$

où les deux premières quantités sont incluses dans la description de champ moyen avec les états HF ; quant à la troisième, elle correspond aux corrélations d'appariement. Afin d'alléger les équations, nous écrivons dans la suite $|-\rangle_{qp} = |-\rangle$. On voit que l'état HFB suppose une forme particulière de la matrice de corrélation \hat{C}^2 , le dernier membre de l'équation ci-dessus. En introduisant la matrice densité anormale

$$\kappa_{ij}^* = \frac{\langle -|a_i^\dagger a_j^\dagger|-\rangle}{\langle -|-\rangle}, \quad (2.33)$$

on peut réécrire une relation équivalente à l'équation (2.7)

$$\kappa_{ij}^* \kappa_{lk} = \rho_{lkji}^2 + \rho_{li}^1 \rho_{kj}^1 - \rho_{ki}^1 \rho_{lj}^1, \quad (2.34)$$

ainsi on identifie l'expression séparable de la matrice des corrélations HFB/BCS

$$C_{lkji}^2 = \kappa_{ij}^* \kappa_{lk}. \quad (2.35)$$

Une conséquence immédiate est d'identifier que $\hat{C}^2 \neq 0$, ce qui va créer une distribution des probabilités d'occupation. Par exemple, dans la base canonique on a $\hat{\rho}_{ij}^1 = \delta_{ij} v_i^2 \neq 0 / 1$. En conséquence, l'équation ci-dessus montre l'intérêt d'utiliser des états de quasi-particules plutôt que des états de Slater, puisqu'ils permettent de décrire des corrélations non nulles associées à l'appariement entre les particules.

2.1.2.2 La théorie Hartree-Fock-Bogoliubov

La théorie HFB se déduit en utilisant pour l'état de référence (SR-EDF) un vide de quasi-particules. Dans le cas d'un Hamiltonien à deux corps, en utilisant le théorème de Wick, l'énergie HFB s'écrit

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^1 + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{li}^1 \rho_{kj}^1 + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{ij}^* \kappa_{lk}, \quad (2.36)$$

qui inclut le terme cinétique et une interaction à deux corps. Cette expression généralise la théorie Hartree-Fock avec la présence du terme de corrélation, fonctionnel de la densité anormale.

Ainsi, on voit bien que l'approximation de particule indépendante s'obtient dans la limite $\kappa = 0$, limite des

corrélations nulles. Si la théorie HFB est combinée à un principe variationnel, on a $\langle \hat{H} \rangle \leq E_{HF}$, où E_{HF} est l'énergie prédite par l'état HF. En effet, la minimisation dans l'espace des vides de quasi-particules revient à faire des variations sur un espace de Hilbert plus grand que celui formé par les états de Slater. Le principe variationnel distingue automatiquement laquelle des deux approches est la plus favorable pour le minimum de l'énergie.

Par la suite, nous nous intéresserons plus particulièrement à la forme de l'énergie dans la base qui diagonalise la densité à un corps $\hat{\rho}^1$. Dans le cas de la théorie HFB, cela revient à faire $\rho_{ji} \rightarrow \delta_{ij} n_i$ et $\kappa_{ij}^* \rightarrow \delta_{j\bar{i}} \sqrt{n_i(1-n_i)}$. L'énergie devient alors fonctionnelle des probabilités d'occupation n_i et des états propres ϕ_i de $\hat{\rho}^1$ et s'écrit

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_i t_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij} n_i n_j + \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} \sqrt{n_i(1-n_i)} \sqrt{n_j(1-n_j)}, \quad (2.37)$$

on a alors le schéma suivant

$$(U_{ik}, V_{ik}) \longrightarrow (\hat{\rho}^1, \kappa) \longrightarrow E[\hat{\rho}^1, \kappa]. \quad (2.38)$$

Il est à noter qu'à faible couplage (i.e. limite des corrélations d'appariement proches de zéro), on obtient l'approximation de particule indépendante lorsqu'on applique le principe variationnel, et dans ce cas, il n'est pas possible de décrire correctement les corrélations. Comme nous le verrons dans le chapitre 4, un moyen de palier à cette limitation est d'utiliser un état BCS/HFB projeté sur l'espace de Fock de N particules. Le caractère cohérent de l'ansatz BCS-HFB permet une dérivation puis une résolution analytique du principe variationnel ou des méthodes numériques très efficaces pour trouver le minimum[38, 39], comme par exemple la méthode du gradient.

2.1.2.3 Motivation expérimentale de l'utilisation d'une théorie incluant l'appariement

En physique nucléaire, l'introduction de théorie incluant l'appariement a été faite suite à la proposition de BCS en matière condensée, en observant les différences d'énergie des noyaux pair-pair avec leur voisin dont le nombre de proton/neutron est impair. Quelques observations sont discutées ici ainsi que la façon avec laquelle elles peuvent être comprises avec les mains dans une théorie HFB.

L'introduction de l'appariement permet de traiter un spectre d'excitation modifié par rapport à l'approximation de particule indépendante. En effet, l'approximation HFB revient à utiliser un Hamiltonien effectif écrit en terme d'opérateurs de création/annihilation de quasi-particules associés au vide de qp³ sur l'Hamiltonien du système

$$\hat{H}_{HFB} \approx \langle -|\hat{H}|- \rangle + \sum_i E_i b_i^\dagger b_i. \quad (2.39)$$

³Cette expression est obtenue en réécrivant l'Hamiltonien dans la base de quasi-particules et en gardant uniquement sa partie normale pour les opérateurs de quasi-particule celle-ci devient diagonale suite à l'application du principe variationnel.

Le spectre d'excitation associé à ce Hamiltonien est formé des états de une, deux, ..., excitations de quasi-particules par rapport au vide de qp, c'est-à-dire

$$\begin{aligned}
 & b_i^\dagger |-\rangle, \\
 & b_i^\dagger b_j^\dagger |-\rangle, \\
 & b_i^\dagger b_i^\dagger |-\rangle, \\
 & \dots
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

Leurs énergies sont respectivement E_i , $E_i + E_j$, $2E_i$, ... Encore une fois, nous pouvons obtenir une forme plus explicite en les écrivant dans la base canonique de la densité $\hat{\rho}^1$, on a alors[34]

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_k^2}, \tag{2.41}$$

où ε_k est une valeur propre du Hamiltonien de champ moyen (Eq. 2.13), Δ_k une valeur propre de la contribution des corrélations d'appariement à l'énergie totale et λ est l'énergie de Fermi. Cette dernière quantité est souvent appelée gap de pairing. Remarquons que les excitations d'une quasi-particule décriront les noyaux impairs puisqu'elles contiennent un nombre impair d'opérateurs de création. Quant aux excitations de deux quasi-particules, elles décrivent deux façons d'exciter les noyaux pair-pair : soit en brisant une paire, soit en brisant simultanément deux paires. Cette manière de construire les états excités donne des énergies très proches des observations. En effet, dans le cas d'un noyaux pair-pair où tous les nucléons sont appariés, l'excitation la plus basse en énergie serait de briser une pair près du niveau de Fermi c'est-à-dire $\varepsilon_k - \lambda \approx 0$ donc $E_k \approx \Delta_{k_F}$, puis ensuite deux paires $\approx \Delta_{k_F} + \Delta_{k'_F}$. De

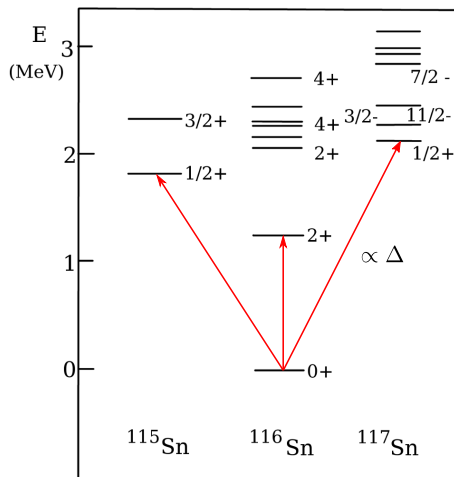


FIG. 2.2: Les premiers niveaux en énergie du spectre d'excitation des noyaux d'étain ^{115}Sn , ^{116}Sn et ^{117}Sn observés expérimentalement, sont illustrés sur cette figure. Les flèches rouges mettent en évidence les quantités expérimentales qui peuvent être reliées au gap de pairing Δ du modèle schématisé de BCS, entre l'état fondamental du noyau pair d'étain ^{116}Sn vers son premier état excité et vers les noyaux impairs voisins. Cette figure est adaptée à partir de la référence [3].

même, on retrouve la différence attendue entre les noyaux doublement pairs et les noyaux impairs. En effet, l'état fondamental d'un noyau impair serait décrit par l'état d'une quasi-particule dont la différence

d'énergie par rapport au noyau pair voisin est $\approx \Delta_{k_F}$. Par exemple, sur la figure 2.2, on a illustré à partir de la référence[3] les premiers niveaux d'excitation des noyaux d'étain ^{115}Sn , ^{116}Sn et ^{117}Sn obtenus expérimentalement. Sur cette figure, les gaps en énergie entre l'état fondamental et le premier état excité, et entre l'état fondamental du noyau pair ^{116}Sn et ceux de ses voisins impairs sont représentés. Ces gaps dans la spectroscopie nucléaire peuvent être expliqués, en première approximation, grâce à la théorie BCS/HFB et reliés aux gaps de pairing Δ_k . Des discussions plus complètes, en particulier sur les contributions à l'effet pair-impair, peuvent être trouvées dans les références [40, 41]. Comme nous pouvons le voir sur cette figure, l'effet de l'appariement est très dépendant du nombre de protons et de neutrons, ce qui motive l'inclusion des corrélations d'appariement au niveau SR-EDF.

2.1.3 Théorie fonctionnelle de la densité

Nous avons déjà discuté au début de ce chapitre que l'utilisation d'interaction avec cœur dur pose de sérieux problèmes pour appliquer les théories traitant le problème à N-corps. Jusque récemment, les théories HF ou HFB ne pouvaient tout simplement pas être utilisées, car elles donneraient des résultats divergents si des méthodes d'habillage de la force[42] n'étaient pas appliquées. Avec l'introduction de nouvelles forces renormalisées, on peut désormais appliquer les méthodes HF ou HFB. Toutefois les résultats obtenus [43] restent très loin de la réalité, et des méthodes beaucoup plus complexes, comme la théorie des perturbations, doivent être employées. De fait, ces techniques deviennent coûteuses numériquement et ne permettent pas en pratique de décrire la carte des noyaux dans sa globalité.

Nous faisons ainsi face au dilemme suivant : "Alors que l'expérience semble montrer que l'observation est en première approximation compatible avec des nucléons évoluant de manière quasi-indépendante dans un champ moyen effectif, la théorie a priori naturelle (HF) pour introduire ce champ moyen, lorsqu'elle est appliquée au Hamiltonien nucléaire, ne peut décrire correctement les noyaux".

Devant cette difficulté, les physiciens ont introduit des approches phénoménologiques à un corps où les nucléons sont décrits comme des particules indépendantes dans un champ moyen effectif. Ce type d'approche permet de donner une vision très correcte de beaucoup de phénomènes physiques dans les noyaux. En particulier, les théories de champ moyen basées sur des interactions effectives (appelées SR-EDF par la suite) introduites dans les années 70 sont un outil microscopique très puissant[44]. Ces approches ont toutefois été introduites initialement de manière très empirique. Les théories fonctionnelles de la densité permettent de leur donner un cadre formel plus précis. Ci-dessous nous donnons quelques éléments importants associés aux théories fonctionnelles de la densité telles qu'elles ont été introduites en matière condensée. Puis, la stratégie utilisée en physique nucléaire pour construire ces fonctionnelles est illustrée dans le cas spécifique des forces effectives de portée nulle, en particulier des interactions de Skyrme qui seront utilisées dans ce travail.

2.1.3.1 Notions sur les théories fonctionnelles en densité

Considérons un système quantique à N-corps décrit par une fonction d'onde $|\Psi^N\rangle$. Son énergie est une fonctionnelle des composantes de cette fonction d'onde,

$$E = \mathcal{E}[\Psi^N] . \quad (2.42)$$

De manière équivalente, l'énergie peut être écrite comme une fonctionnelle des degrés de liberté à 1, 2 \dots N-corps (cf. section 2.1.1.1 où les densités réduites sont introduites). Ce qui s'écrit sous la forme

$$E = \mathcal{E}[\hat{\rho}^1, \hat{C}^2, \hat{C}^3, \dots] , \quad (2.43)$$

où $\hat{\rho}^1$ est la matrice densité à 1 corps, \hat{C}^2 celle des corrélations à deux corps etc... Par exemple, pour un Hamiltonien à deux corps, l'énergie s'exprime par

$$E = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^1 + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} (C_{lkji}^2 + \rho_{li}^1 \rho_{kj}^1 - \rho_{ki}^1 \rho_{lj}^1) . \quad (2.44)$$

Ainsi nous avons le schéma suivant

$$\Psi^N \longrightarrow \hat{\rho}^1, \hat{C}^2, \dots \longrightarrow \mathcal{E}[\hat{\rho}^1, \hat{C}^2, \dots] , \quad (2.45)$$

où le sens des flèches indique que la quantité à droite est uniquement déterminée par celle(s) de gauche. Toutefois, les densités à 1, 2 \dots N-corps restent des quantités complexes auxquelles on n'a jamais accès (expérimentalement), en particulier dans le cas réaliste en physique nucléaire. D'un point de vue pratique, le problème réduit aux degrés de liberté à un corps est souvent le seul qu'on puisse résoudre de manière simple. Ainsi, les physiciens de matière condensée se sont posés la question suivante : "Peut-on remplacer le problème à N-corps par un problème à 1-corps et néanmoins obtenir exactement l'énergie du système ?". Pour les systèmes électroniques, Hohenberg et Kohn ont montré que la réponse est oui [9].

Les électrons sont liés par un potentiel local extérieur, noté $V_{ext}(r)$. La contribution de l'environnement à l'énergie s'écrit alors $\int dr V_{ext}(r) \rho(r)$, et l'énergie du système devient

$$E = \mathcal{E}[\hat{\rho}^1, \dots] + \int dr V_{ext}(r) \rho(r) . \quad (2.46)$$

Le potentiel extérieur détermine l'énergie du système, en effet on a l'enchaînement suivant $V_{ext}(r) \rightarrow \mathcal{E} \rightarrow \Psi^N$. Alors, on peut écrire cette énergie totale comme une fonctionnelle du potentiel extérieur

$$E = \mathcal{E}[V_{ext}(r)] . \quad (2.47)$$

Hohenberg et Kohn (HK) ont montré que le potentiel $V_{ext}(r)$ est uniquement (à une constante près) déterminé par la densité locale à un corps $\rho(r) = \hat{\rho}^1(r, r)$ de l'état fondamental, donc on reconnaît une dépendance fonctionnelle $V_{ext}(r) \rightarrow \mathcal{V}[\rho(r)]$. Finalement, on a l'enchaînement suivant

$$\mathcal{V} \longrightarrow \mathcal{E} \longrightarrow \Psi^N \longrightarrow \rho(r) \longrightarrow \mathcal{V} . \quad (2.48)$$

La boucle, permise par le théorème HK, force des relations fonctionnelles équivalentes entre toutes les quantités. Ainsi, on a prouvé que Ψ^N est une fonctionnelle de $\hat{\rho}^1$. Finalement, on peut écrire l'énergie du système comme une fonctionnelle de la densité locale à un corps,

$$E = \mathcal{E}[\rho(r)] . \quad (2.49)$$

Ce théorème d'existence est très puissant car il réduit la dépendance spatiale de l'énergie de $(r_1, r'_1 \dots)$ à (r) . C'est donc une simplification majeure. Le second corollaire de ce théorème dit que l'énergie exacte de l'état fondamental du système correspond au minimum de la fonctionnelle $E = \mathcal{E}[\rho(r)] + \mathcal{V}[\rho(r)]$ et que la densité locale à 1-corps associée à ce minimum est celle de la solution exacte.

Kohn et Sham [45] ont proposé une méthode pour résoudre la minimisation de l'énergie. L'idée est d'introduire des états à un corps fictifs pour exprimer la densité à un corps. Par exemple, dans la méthode HF, il était possible de traiter la recherche de minimum en utilisant les états à un corps à partir desquels est construit le déterminant de Slater ou plus simplement en notant que dans ce cas $\rho = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$. Par analogie, ils ont proposé d'utiliser des orbitales à un corps fictives ψ_i pour résoudre le problème variationnel (section 5.1.1). On peut alors remplacer la différenciation de l'énergie par rapport à ρ , par $\sum_i (\delta\mathcal{E}[\rho]/\delta\psi_i^*)$ et résoudre les équations aux valeurs propres associées aux orbitales ψ_i de façon tout à fait analogue à la théorie HF. L'avantage est de pouvoir utiliser les mêmes méthodes de résolution que dans la théorie des particules indépendantes. Ainsi, le problème à N-corps a été reformulé en un système de particules indépendantes soumis à un potentiel effectif

$$\nu_i^{eff}[\rho] = \frac{\delta^2}{\delta\psi_i^* \delta\psi_i} \left(E[\rho] + \sum_i \psi_i^* \vec{\nabla}_{\triangleleft} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_{\triangleright} \psi_i \right) , \quad (2.50)$$

où on a retranché la partie cinétique à l'énergie et utilisé les notations \triangleleft et \triangleright pour reconnaître qu'un opérateur s'applique soit à gauche soit à droite. Au final, on obtient ainsi des équations sur les états à un corps ψ_i qui se mettent sous la forme

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \nu_i^{eff}[\rho] \right) \psi_i = \varepsilon_i \psi_i . \quad (2.51)$$

En conséquence, on a à résoudre un potentiel auto-cohérent qui est censé donner à la fois un minimum de l'énergie correspondant à l'énergie exacte, et à la densité locale à un corps exacte du problème à N-corps. En résumé :

- La version originale de la méthode de Hohenberg, Kohn (HK) et Kohn, Sham (KS) conduit à remplacer le problème à N-corps par un problème effectif à un corps avec le schéma suivant (KS)

$$\psi_i \longrightarrow \rho \longrightarrow \nu_i^{eff}[\rho] \longrightarrow \mathcal{E}[\rho] \longrightarrow \psi_i , \quad (2.52)$$

beaucoup plus simple que le problème initial.

- Ce schéma ressemble beaucoup à la théorie HF, cependant la DFT est un outil beaucoup plus puissant. Là où HF est une approximation, la DFT est une reformulation exacte du problème à N-corps. Elle est censée donner l'énergie exacte. De plus, alors que l'énergie est une fonctionnelle de $\rho^1(r, r')$ dans l'approximation de particules indépendantes, ici on a une simplification supplémentaire car l'énergie est fonctionnelle de $\rho(r)$ seulement.
- La DFT donne des informations physiques sur l'énergie E et sur la densité locale $\rho(r)$ *seulement*. Ainsi, c'est une théorie dédiée à des observables spécifiques. On pourra calculer des observables locales uniquement. Par construction, toutes celles nécessitant l'utilisation de la matrice densité à un corps totale (i.e. non locale) ne peuvent être déduites de cette théorie.
- La principale difficulté de la théorie de la fonctionnelle en densité est de trouver la forme de la fonctionnelle elle-même. Les théorèmes HK et KS ne donnent en effet aucune indication de comment l'obtenir.

Il existe un grand nombre de propositions d'extension de la DFT. Quelques unes d'entre elles, d'intérêt pour les travaux présentés dans ce document, sont mentionnées ci-dessous :

- La méthode de l'approximation locale[46] (LDA pour "local density approximation") propose d'écrire l'énergie comme une fonctionnelle de la densité locale à un corps, $\rho(r)$ uniquement, tel que des puissances de la densité etc. Ses extensions (GEA, GGA et Méta GGA) tiennent compte de l'in-homogénéité de la matière en proposant des dépendances de l'énergie en gradients de la densité locale et en courants des orbitales fictives. Alors l'énergie est exprimée en général comme une fonctionnelle de ρ et $\vec{\nabla}\rho$ mais aussi en fonction des courants tel que $\tau = \sum_i |\vec{\nabla}\psi_i|^2$.
- La DFT peut être étendue pour prédire plus d'observables physiques. Par exemple, Gilbert [10] a montré qu'il était possible d'écrire l'énergie comme une fonctionnelle de la densité non-locale $\rho^1(r, r')$. Cela conduit à une théorie fonctionnelle de la matrice densité à un corps (DMFT pour "density matrix functional theory") car au minimum toute l'information sur les observables à un corps est prédite.
- A l'instar de la DMFT, il est possible d'inclure des quantités contenant de l'information supplémentaire telle que la densité anormale κ qui permet d'inclure l'appariement dans les théories fonctionnelles[47]. La dépendance de l'énergie est alors étendue comme $\rho \rightarrow (\hat{\rho}, \kappa)$.
- Il est finalement possible de construire une théorie fonctionnelle dans le repère intrinsèque du système considéré, cela offre un cadre théorique permettant de justifier certaines approches fonctionnelles traitant les systèmes auto-liés tels que les noyaux[48].

Les théories DFT sont couramment utilisées en physique de la matière condensée, elles ont permis de nombreuses applications pour décrire les systèmes électroniques qui seraient de loin impossibles si le problème à N-corps était traité exactement[49]. Ces approches sont également largement utilisées en physique nucléaire où elles prennent le nom de théories de l'énergie fonctionnelle de la densité (EDF pour "energy density functional"). Bien que la stratégie et le problème physique soient très différents comparés aux systèmes électroniques, notamment car les nucléons sont auto-liés (et ne sont pas liés par les ions environnants), le principe reste le même. L'idée étant de remplacer le problème à N-corps, trop complexe, par un problème à un corps effectif permettant de traiter certaines propriétés exactement. La stratégie standard utilisée en physique nucléaire pour construire l'EDF est décrite dans la fin de ce chapitre.

2.1.3.2 Construction du SR-EDF, avec le potentiel effectif de Skyrme

Historiquement, les théories fonctionnelles en densité ont été introduites en physique nucléaire en utilisant des interactions effectives. Les plus courantes sont les interactions de portée nulle de type Skyrme[24] ou de portée finie de type Gogny[25]. La force de Skyrme qui a été utilisée dans cette thèse est présentée ici à titre d'illustration. Dans un article pionnier, Vautherin et Brink[50] ont utilisé, pour obtenir une EDF, un Hamiltonien contenant des interactions à deux et trois corps de portée nulle dont les expressions ont été initialement proposées par Skyrme. L'énergie peut alors s'écrire sous une forme très similaire à celle obtenue dans la théorie HF

$$\mathcal{E}[\rho^1] = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}^{\rho\rho} \rho_{li} \rho_{kj} . \quad (2.53)$$

Selon la complexité de l'interaction effective, il existe différentes paramétrisations de $\bar{v}^{\rho\rho}$ où $\bar{v}_{ijkl}^{\rho\rho} = \langle \psi_i \psi_j | \bar{v}^{\rho\rho} | \psi_k \psi_l \rangle$. L'une des plus courantes est

$$\begin{aligned} v^{\rho\rho} = & \quad t_0 (1 + x_0 P_{\sigma_1 \sigma_2}) & \text{Terme central ,} \\ & + \frac{t_1}{2} (1 + x_1 P_{\sigma_1 \sigma_2}) \left(\vec{\nabla}_{\triangleleft}^2 + \vec{\nabla}_{\triangleright}^2 \right) & \text{Termes non locaux ,} \\ & + t_2 (1 + x_2 P_{\sigma_1 \sigma_2}) \left(\vec{\nabla}_{\triangleleft} \cdot \vec{\nabla}_{\triangleright} \right) & \\ & + t_3 (1 + x_3 P_{\sigma_1 \sigma_2}) \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) & \text{Dépendance en puissance de la densité ,} \\ & + iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \left(\vec{\nabla}_{\triangleleft} \times \vec{\nabla}_{\triangleright} \right) & \text{Interaction de spin-orbite ,} \end{aligned} \quad (2.54)$$

et

$$\bar{v}^{\rho\rho} = v^{\rho\rho} (1 - P_{\sigma_1 \sigma_2} P_{\tau_1 \tau_2} P_{r_1 r_2}) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) ,$$

où $P_{\sigma_1 \sigma_2}$, $P_{r_1 r_2}$ et $P_{\tau_1 \tau_2}$ correspondent respectivement aux opérateurs d'échange de spin, d'échange de position et d'échange d'isospin. Dans ce contexte, $\vec{\sigma}_1$ et \vec{r}_1 (resp. $\vec{\sigma}_2$ et \vec{r}_2) agissent sur l'état à un corps

dénoté ψ_1 (resp. ψ_2). Dans la suite, nous utiliserons σ_i (resp. τ_i) pour repérer le spin (resp. l'isospin) up (\uparrow) ou down (\downarrow) associé à l'état à un corps ψ_i . De plus, un état d'isospin up sera associé à un neutron, quant à un état d'isospin down, il sera associé à un proton. Historiquement, la dépendance en puissance de la densité est obtenue à partir d'une composante à trois corps de l'interaction,

$$v(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = t_3 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3), \quad (2.55)$$

dont la particularité est de se resommer en une contribution à deux corps. Ce cas s'identifie dans l'équation ci-dessus à $\alpha = 1$, et correspond à la paramétrisation SIII de l'interaction de Skyrme.

La dépendance en puissance non entière de la densité a été motivée pour reproduire la description du module d'incompressibilité des systèmes nucléaires[51, 52]. Elle améliore également la qualité de la description des observables tel que le rayon des noyaux. Au final, l'énergie SR-EDF s'exprime comme une fonctionnelle de la densité des protons/neutrons et des courants associés

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\rho] = \int d\vec{r} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \tau + B_1 \rho^2 + B_2 (\rho_n^2 + \rho_p^2) + B_3 \rho \tau + B_6 (\rho_n \Delta \rho_n + \rho_p \Delta \rho_p) \right. \\ + B_4 (\rho_n \tau_n + \rho_p \tau_p) + B_5 \rho \Delta \rho + B_7 \rho^{2+\alpha} \\ + B_8 \rho^\alpha (\rho_n^2 + \rho_p^2) + B_9 (\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J}) + B_{10} (\rho_n \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \rho_p \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p) \\ \left. + \frac{1}{16} (t_1 x_1 - t_2 x_2) \vec{J}^2 - \frac{1}{16} (t_1 - t_2) (\vec{J}_n^2 + \vec{J}_p^2) \right), \end{aligned} \quad (2.56)$$

où pour plus de clarté, les dépendances en position sont omises et les contributions de l'antisymétrisation en fonction des coefficients t_z, x_z sont incluses dans la définition des paramètres $B_{z'}$ et où l'invariance par renversement du temps est supposée. La forme explicite de ces coefficients peut être trouvée dans la ref[53]. Dans ce travail les contributions en \vec{J}_x^2 seront négligées dans le cadre des paramétrisations de type SIII et SLy4, une discussion plus approfondie sur ce sujet peut être trouvée dans la référence [54]. Une conséquence est entre autre d'accentuer la brisure de l'antisymétrisation de la fonctionnelle qui est discutée dans la suite de cette thèse (section 3.1.1). Pour exprimer l'énergie, nous avons utilisé les densités locales des neutrons et protons, respectivement $\rho_n = \sum_i \delta_{\tau_i \uparrow} |\psi_i|^2$ et $\rho_p = \sum_i \delta_{\tau_i \downarrow} |\psi_i|^2$ ainsi que la densité nucléaire totale $\rho = \rho_n + \rho_p$ et que des termes de courant définis par

$$\tau = \sum_i n_i |\vec{\nabla} \psi_i|^2, \quad (2.57)$$

$$\vec{J} = -i \sum_{i\sigma_1\sigma_2} n_i \psi_{i\sigma_1}^* (\vec{\nabla} \psi_{i\sigma_2}) \times \langle \sigma_1 | \hat{\sigma} | \sigma_2 \rangle. \quad (2.58)$$

Il faut remarquer que pour un état de référence de type HF on a $n_i = 1$ ou 0, ainsi cette dépendance se simplifie dans ce cas. Il est important de noter que l'utilisation d'interaction peut être ici vue comme une méthode élégante pour obtenir une forme de l'énergie en terme des densités et de leurs dérivées.

En effet, au lieu d'une interaction effective, la méthode EDF peut être directement formulée à partir de l'énergie (Eq. 2.56) qui peut éventuellement être exprimée comme une fonctionnelle des orbitales ψ_i sous-jacentes

$$\mathcal{E} [\rho, \tau, \vec{J}] \longleftrightarrow \mathcal{E} [\psi_i^*, \psi_i] . \quad (2.59)$$

Pour trouver l'énergie et la densité nucléaire, il faut minimiser la fonctionnelle par rapport à ces orbitales sous certaines contraintes,

$$\mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{E} [\psi_i^*, \psi_i] - \sum_{ij} \varepsilon_{ij} (\psi_i^* \psi_j - \delta_{ij}) - \lambda_n (Tr \rho_n - N_n) - \lambda_p (Tr \rho_p - N_p) , \quad (2.60)$$

qui permettent d'assurer le bon nombre de particules N_p pour les neutrons et N_n pour les protons. La minimisation correspond à résoudre des équations aux valeurs propres (ε_i) associées aux orbitales ψ_i avec un potentiel effectif v_i^{eff} dont la dérivation est obtenue dans le cas d'un neutron, par

$$\begin{aligned} \bar{v}_i^{eff} &= \frac{\delta^2 \mathcal{E} [\psi_i^*, \psi_i]}{\delta \psi_i^* \delta \psi_i} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*} \tau + 2B_1 \rho + 2B_2 \rho_n + B_3 \tau_n + B_4 \tau_n \\ &\quad + 2B_5 \Delta \rho + 2B_6 \Delta \rho_n + (2 + \alpha) B_7 \rho^{1+\alpha} + B_8 (\alpha \rho^{\alpha-1} (\rho_n^2 + \rho_p^2) + \rho^\alpha \rho_n) \\ &\quad + B_9 \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + B_{10} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n . \end{aligned} \quad (2.61)$$

Cette technique sera utilisée dans le chapitre 4. La forme fonctionnelle utilisée en physique nucléaire possède différents caractères qui sont également développés dans la DFT électronique, tels que

- En pratique, les coefficients $\{B_z\}$ sont directement ajustés sur certaines observables expérimentales telles que l'énergie, et donc de manière analogue à la DFT, le but de ces théories est de reproduire de manière globale l'énergie du système tout en remplaçant le problème complexe initial par un problème plus simple à résoudre.
- On voit que le niveau zéro de l'EDF contient déjà des termes en τ et \vec{J} , et donc correspond au moins au niveau Méta GGA utilisé en matière condensée.
- Elle inclut des termes en puissance non entière de la densité tel que ρ^α . Ce terme peut être identifié à une interaction effective Hamiltonienne si α est un entier. Toutefois, lorsque α n'est pas un entier, cela conduit à des interactions effectives dépendantes de l'état et donc la connexion avec la théorie Hamiltonienne est perdue.
- Pour les protons, on ajoute à l'EDF les contributions directe et d'échange de coulomb, cette dernière étant approchée par la forme fonctionnelle

$$V_{coul} = -e^2 \left(\frac{3\rho_p}{\pi} \right)^{1/3} \quad (2.62)$$

dérivée de l'approximation de particule indépendante. Cette approximation est appelée approximation de Slater. Elle aussi fait que le lien avec un Hamiltonien est perdu.

Afin de décrire l'appariement au niveau SR-EDF, guidé par le cas Hamiltonien, l'état auxiliaire de Slater à partir duquel est construit la densité est remplacé par un vide de quasi-particules à partir duquel on construit à la fois la densité normale $\rho^1(r, r')$ et la densité anormale κ . De manière similaire à l'Eq. (2.36), l'énergie est écrite comme une somme de deux termes

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}^{\rho\rho} [\rho, \tau, \vec{J}] + \mathcal{E}^{\kappa\kappa} [\rho, \kappa^*, \kappa], \quad (2.63)$$

où la fonctionnelle $\mathcal{E}^{\rho\rho}$ est donnée par (2.56), tandis que $\mathcal{E}^{\kappa\kappa}$ est écrite sous la forme suivante

$$\mathcal{E}^{\kappa\kappa} [\kappa^*, \kappa] = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl}^{\kappa\kappa} \kappa_{ij}^* \kappa_{lk}. \quad (2.64)$$

L'interaction effective $\bar{v}^{\kappa\kappa}$ est différente de celle utilisée dans le canal particule-trou et le plus souvent s'écrit comme

$$\bar{v}^{\kappa\kappa} = g \left[1 - \left(\frac{\rho^1}{\rho_0} \right)^\alpha \right] \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (2.65)$$

où ρ_0 est la densité nucléaire à la saturation et g la constante d'appariement. Il est également important de noter que l'introduction de l'appariement modifie la définition des densités qui doivent maintenant prendre en compte la distribution des nombres d'occupation, ainsi on a $\rho^1(\vec{r}) \rightarrow \sum_i n_i |\psi_i|^2(\vec{r})$.

La flexibilité des théories DFT est un grand avantage puisqu'elle permet d'avoir un potentiel effectif dit de champ moyen bien plus élaboré que dans une théorie Hamiltonienne, où il faut le plus souvent resommer de nombreux termes pour obtenir un effet équivalent. Cependant, les dépendances en densité ne sont pas choisies au hasard, en général, la construction d'une fonctionnelle est largement guidée par le cas Hamiltonien, notamment en imposant que certaines symétries Hamiltoniennes soient conservées. Toutefois, l'utilisation de $\bar{v}^{\kappa\kappa} \neq \bar{v}^{\rho\rho}$ démontre qu'on ne travaille pas avec une théorie Hamiltonienne. Comme nous le verrons par la suite, cela doit être utilisé avec prudence lorsqu'on combine le mélange de configurations et la théorie EDF.

2.1.3.3 Pouvoir prédictif des théories fonctionnelles : le cas SR-EDF

Tout comme en DFT, les théories EDF basées sur un seul vide de référence sont construites avant tout pour reproduire l'énergie totale du système et la densité locale à un corps. La méthode de construction de la fonctionnelle, basée sur les interactions effectives donne des résultats tout à fait remarquables. Par exemple, dans la figure 2.3 les différences entre l'énergie de liaison expérimentale et celle prédite par la méthode SR-EDF utilisant l'interaction effective SLy4 et une interaction d'appariement du type Eq. (2.65), sont tracées en fonction du nombre de neutrons.

Sachant que l'énergie de liaison d'un noyau de A nucléons est à peu près proportionnelle à $A \times 8$ MeV, le domaine en énergie totale représenté dans la figure 2.3 est de 80 MeV à 1915 MeV. Ainsi, les erreurs dans les prédictions théoriques présentées dans la figure sont au maximum de $\approx 7\%$ pour les noyaux légers, et en moyenne bien plus faibles. A titre de comparaison interdisciplinaire, une DFT dont l'erreur maximum sur l'énergie est inférieure à la dizaine de pour-cent est considérée, en matière condensée, comme très compétitive. Nous pouvons remarquer des désaccords localisés vers les nombres magiques 20, 50, 82 et 126 au niveau de la systématique illustrée par la figure. Comme expliqué dans la référence [2, 55], c'est un des désavantages de ces théories et une motivation

pour aller au-delà de la théorie SR-EDF en incluant les corrélations résiduelles (cf section 2.2) qui permettent de corriger au moins en partie les différences d'énergies de liaison entre les noyaux magiques ou non. Le traitement des corrélations d'appariement au-delà de l'utilisation de vides de quasi-particules fait parti de cet objectif.

La seconde quantité qui peut être prédite par une théorie de la fonctionnelle en densité, c'est-à-dire la densité locale à un corps des protons/neutrons, peut être sondée expérimentalement (pour les protons) en utilisant des expériences de diffusion d'électrons dans les noyaux (e, e'). La figure 2.4 présente une comparaison entre les profils en densité de proton issus des observations expérimentales (cercles pleins noirs) et ceux obtenus avec une théorie SR-EDF (lignes continues) pour quelques noyaux représentatifs de la charte nucléaire. Les résultats théoriques reproduisent de manière tout à fait étonnante les densités de charge des noyaux en question.

Ces deux exemples illustrent la puissance de la théorie EDF puisqu'elle reproduit avec une bonne précision les énergies de liaison et les densités nucléaires tout le long de la charte des noyaux. Toutes les autres méthodes développées en physique nucléaire sont restreintes aux noyaux légers ou de masse intermédiaire. La force de la méthode fonctionnelle est de traiter de façon globale la description des noyaux jusque dans la matière nucléaire infinie. Par exemple, elle est également utilisée pour décrire les propriétés des étoiles à neutron[56], la dynamique[57] et la thermodynamique des systèmes nucléaires finis[53].

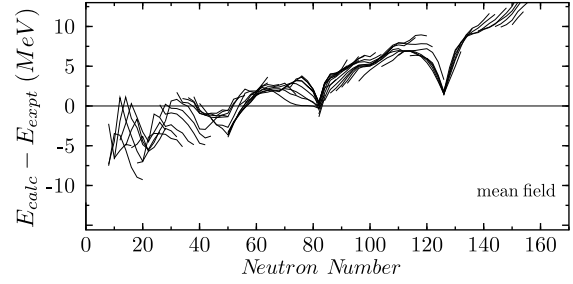


FIG. 2.3: Les différences entre l'énergie de liaison expérimentale et celle prédite par la méthode SR-EDF avec l'interaction SLy4 et une interaction d'appariement donnée par l'équation (2.65), sont tracées en fonction du nombre de neutrons à l'aide de la méthode Lipkin-Nogami (cf. section 5.2.4). Les lignes continues représentent les chaînes isotopiques. Cette figure est adaptée de la référence [2].

Introduction des calculs sous contraintes :

La méthode EDF peut être étendue pour connaître les propriétés en dehors de l'état fondamental en utilisant des calculs sous contraintes. Par exemple, en rajoutant à l'énergie SR-EDF une contrainte sur une observable à un corps \hat{Q}^1 . Cela revient à remplacer l'énergie SR-EDF par

$$\mathcal{E}^{SR-EDF} \longrightarrow \mathcal{E}^{SR-EDF} - \zeta (Tr \hat{Q}^1 \hat{\rho}^1 - q), \quad (2.66)$$

où ζ est un paramètre de Lagrange. On impose ainsi que la valeur moyenne de l'observable \hat{Q}^1 soit égale à q au minimum de l'énergie SR-EDF. Cette méthode de minimisation permet de tracer des courbes d'énergie potentielle (PES) en fonction de q . Les observables qui sont utilisées pour contraindre l'énergie sont souvent choisies en fonction des données expérimentales et correspondent généralement à des variables collectives. Par exemple, de nombreuses observations mettent en évidence la nécessité de décrire la déformation des noyaux, où un cas particulier est la déformation quadrupolaire. Dans ce cas, l'observable impliquée dans la contrainte est l'opérateur quadrupolaire noté \hat{Q}_{20} dont l'expression moyenne est $\langle \hat{Q}_{20} \rangle = Q_{20} = 2z^2 + y^2 + z^2$. Le paramètre β_2 , défini par

$$\beta_2 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{4\pi}{3R^2A} \langle \hat{Q}_{20} \rangle, \quad (2.67)$$

où A correspond au nombre de nucléons et R est le rayon nucléaire, est souvent utilisé pour contraindre la déformation quadrupolaire. La figure 2.5 présente les PES obtenues pour les isotopes du Néon $N = 20, 22,$

24, 26, 28, 30, 32 et 34 en fonction de la déformation quadrupolaire Q_{20} . Certaines des courbes ont été translatées par mesure de clarté, le décalage en énergie est précisé sur la figure. Une interaction de portée finie proposée par Gogny[25], qui forme l'autre grande famille des interactions effectives utilisées en physique nucléaire, a été employée dans le canal particule-trou et particule-particule. Les courbes d'énergie potentielle nous permettent une analyse plus fine de la solution SR-EDF avec ou sans contrainte. En effet, on peut voir sur la figure 2.5 qu'il existe parfois un second minimum et que parfois il n'y a pas de minimum sphérique. De même la systématique isotopique montre que les PES associées varient énormément en fonction du nombre de nucléons, ce qui nous confirme l'importance de traiter les corrélations

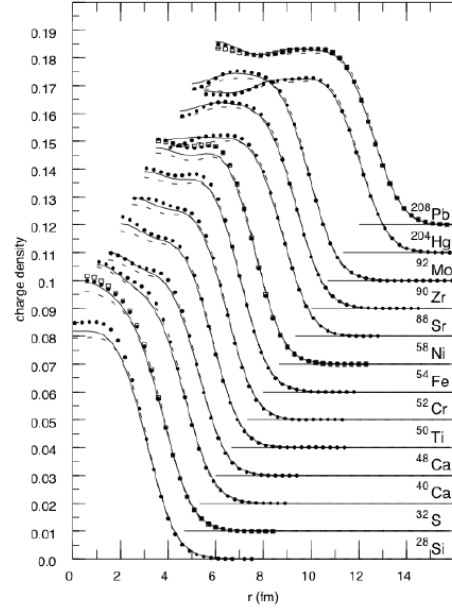
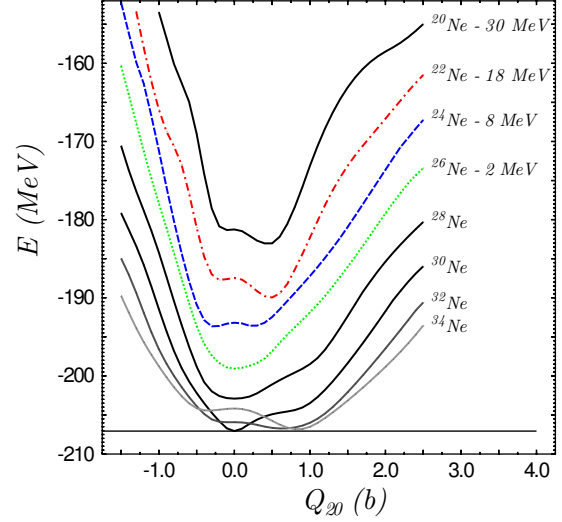


FIG. 2.4: Différences entre les profils en densité de proton issus de l'expérience (cercles pleins noirs) et prédits avec la théorie SR-EDF (lignes continues) pour quelques noyaux ^{28}Si , ^{32}S , ^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{50}Ti , ^{52}Cr , ^{54}Fe , ^{58}Ni , ^{88}Sr , ^{90}Zr , ^{92}Mo , ^{204}Hg et ^{208}Pb . Cette figure est adaptée à partir de la référence[58], compilation donnée par B. A. Brown.

FIG. 2.5: Les courbes d'énergie potentielle des isotopes pairs du Néon $N = 20, 22, 24, 26, 28, 30, 32$ et 34 sont tracées en fonction de la variable collective de déformation quadrupolaire Q_{20} en (b). Certaines des courbes ont été traduites par mesure de clarté, le décalage en énergie est précisé sur la figure. L'évolution du minimum de l'énergie SR-EDF d'une symétrie sphérique $Q_{20} = 0$ pour le noyau ^{26}Ne (ligne pointillée court verte) vers une déformation quadrupolaire pour le noyau ^{22}Ne (ligne pointillée alternée court-long rouge) en passant par un noyau isomère le noyau ^{24}Ne (ligne pontillée long bleue) où un état sphérique et un état déformé coexistent, illustre la brisure de symétrie prédite par la théorie SR-EDF sous contrainte[59].



collectives, par une méthode plus élaborée que des dépendances en gradient et courant des densités. Par exemple, nous remarquons que le minimum passe d'un état sphérique $Q_{20} = 0$ pour le ^{26}Ne (ligne pointillée court verte) vers une déformation quadrupolaire pour le ^{22}Ne (ligne pointillée alternée court-long rouge) en passant par un noyau isomère le ^{24}Ne (ligne pontillée long bleue) où un état sphérique et un état déformé coexistent. Ainsi, la figure 2.5 nous montre que l'état fondamental du noyau peut être déformé ce qui signifie ici que l'état sous-jacent au niveau SR-EDF, n'a pas un bon nombre quantique associé au moment angulaire L . Ces figures illustrent un cas de brisure spontanée de symétrie apparaissant dans la théorie SR-EDF et permettant d'obtenir des énergies plus basses.

Brisure de symétrie en physique nucléaire et dans a méthode SR-EDF :

La possibilité de briser des symétries est un outil puissant de la méthode SR-EDF qui permet d'inclure des effets non triviaux tout en gardant une approche basée sur un vide de particules ou de quasi-particules. Nous avons vu précédemment que l'utilisation d'états de référence de quasi-particule, qui conservent le nombre de particules en moyenne seulement, est associée à la brisure de la symétrie de jauge $\mathcal{U}(1)$. Dans la figure 2.5, nous illustrons qu'un état avec un moment angulaire défini également en moyenne, permet d'obtenir des énergies plus basses, donc d'inclure des effets physiques supplémentaires de manière relativement simple (économique au niveau SR-EDF). Ci-dessous sont présentées quelques-unes des symétries les plus couramment brisées au niveau SR-EDF ainsi que leur

effet physique associé :

- **Centre de masse** : tous les calculs SR-EDF sont faits dans le repère intrinsèque du noyau (repère attaché au noyau) et non dans le repère du laboratoire où est écrit le Hamiltonien nucléaire. En effet, dans le référentiel du laboratoire le seul Slater vérifiant l'invariance par translation doit être construit sur une base d'états à un corps constituée d'ondes planes, ce qui conduit à une densité nucléaire $\rho(r)$ constante. Néanmoins, les profils de densité observés lors des expériences de diffusion d'électrons, comme sur la figure 2.4, montrent que le noyau est localisé dans l'espace. Les données expérimentales correspondent donc à une photo du repère intrinsèque. En effet, quand le noyau est un système isolé, les symétries du Hamiltonien nucléaire sont respectées. Cependant, les mesures expérimentales sondent la densité du noyau dans le repère intrinsèque et non dans le référentiel du laboratoire où on verrait une superposition d'états décrivant la fonction d'onde nucléaire avec les bonnes symétries. En se plaçant dans le repère intrinsèque au niveau SR-EDF, l'invariance par translation est automatiquement brisée.
- **Déformation** : En autorisant des calculs où le noyau peut se déformer dans son repère intrinsèque, on peut éventuellement obtenir des systèmes déformés dans leur état fondamental. L'existence de noyaux déformés (voir hyper déformés) dans leur fondamental est prouvée expérimentalement par l'apparition de bandes rotationnelles. L'expérience montre que pour décrire les spectres d'excitation expérimentaux, il est nécessaire de considérer différents types de déformations quadrupolaire, octupolaire... qui correspondent aux variables collectives quadrupolaire, octupolaire... Ces déformations brisent toutes les deux la symétrie sphérique mais de manière différente, la déformation quadrupolaire conserve une symétrie axiale alors qu'un noyau de forme octupolaire brise la symétrie de parité. Par exemple, la figure 2.6 présente des formes possibles pour les noyaux, une forme sphérique 2.6a, une forme quadrupolaire 2.6b et une forme octupolaire 2.6c. Sur cette figure, on voit bien l'axe principal de la symétrie quadrupolaire quant à la forme en "poire" de la déformation octupolaire, elle est antagoniste à une symétrie centrale (symétrie de parité). Théoriquement, briser les symétries apporte l'information sur l'état physique (au sens d'être observable expérimentalement) du repère intrinsèque (par exemple la forme du noyau), mais c'est également une méthode très efficace pour inclure des effets physiques non triviaux. En effet, décrire les bandes rotationnelles d'un noyau déformé, dans une théorie conservant les symétries du début à la fin, nécessite un très grand nombre d'harmoniques sphériques. Ce problème est résolu si on décrit l'état intrinsèque comme étant éventuellement déformé et qu'on reconstruit à partir de ce dernier un état possédant les bons nombres quantiques J ou L en considérant une moyenne à un terme d'interférence (un poids) près sur toutes les orientations possibles du repère intrinsèque, alors cette moyenne correspond ni plus ni moins à ce qu'on appelle une "projection" ou une "restauration" de

la brisure de symétrie.

- **L'appariement** : L'extension des méthodes SR-EDF avec l'utilisation de vide de quasi-particules permet de décrire les effets pair-impair dans les noyaux. Cependant, le désavantage d'utiliser ces états est de devoir briser l'invariance de jauge $\mathcal{U}(1)$ qui correspond à la conservation du nombre de particules. La brisure de symétrie associée à la conservation du nombre de particules est plus abstraite, et correspond à un état localisé dans l'espace de jauge. La restauration de cette symétrie sera discutée par la suite.

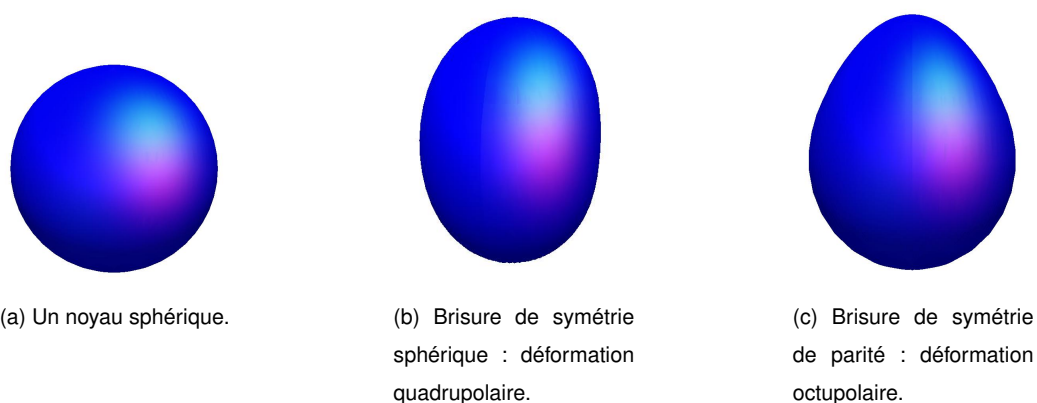


FIG. 2.6: Quelques exemples de déformations possibles pour un noyau. De gauche à droite, la multipolarité de la déformation augmente : un noyau sphérique (2.6a), un noyau dont la déformation est quadrupolaire (2.6b) et un noyau octupolaire (en forme de "poire"), brisant la symétrie de parité (2.6c).

D'autres symétries peuvent être brisées en physique nucléaire, par exemple l'invariance par renversement du temps pour décrire les noyaux dont le nombre de particules est impair[60] ou la symétrie d'isospin[61] pour décrire les noyaux riches en neutrons ou protons. Ce sont des sujets d'actualité, en particulier pour la symétrie d'isospin car certaines données expérimentales tendent à montrer son importance[62].

2.2 Le mélange de configurations et la restauration de symétrie : la méthode MR-EDF

2.2.1 Généralités

Nous avons vu ci-dessus que briser des symétries permet de traiter des effets qu'il aurait été beaucoup plus difficile d'incorporer autrement. De manière générale, une brisure de symétrie peut être

étudiée en introduisant un paramètre d'ordre q . Une symétrie est brisée lorsqu'il existe un minimum dans la courbe d'énergie potentielle à $q \neq 0$, là où $q = 0$ correspond au cas où la symétrie est respectée.

La figure 2.5, ne donne qu'une vision partielle de la notion de brisure de symétrie. Lorsqu'une symétrie est brisée, le plus souvent cela conduit à un ensemble d'états $\{|\Psi(\varphi)\rangle\}$, où φ (de façon plus générale le vecteur $\vec{\varphi}$) correspond à (aux) l'angle(s) de jauge permettant de repérer ces états. Ces états sont tous dégénérés de même énergie et même paramètre d'ordre q , par exemple dans le cas de la brisure de symétrie sphérique, comme le cas de la déformation quadrupolaire, à chaque orientation du repère intrinsèque correspond un état qui a la même énergie et la même déformation que toutes les autres orientations. Ceci est généralement illustré dans un espace de jauge à deux dimensions représenté schématiquement dans la figure 2.7. Dans ce cas, il existe une infinité d'états dégénérés.

L'existence de dégénérescence est à la base de la notion de restauration de symétrie. Dans la mesure où l'Hamiltonien nucléaire possède certaines symétries, l'état propre de ce dernier doit également les respecter. Ainsi, l'utilisation d'états brisant les symétries pour décrire le noyau n'est pas satisfaisante.

Cette difficulté peut être levée en restaurant les symétries initialement brisées, en pratique la restauration de symétrie se fait en moyennant sur l'ensemble des états dégénérés $\Psi(\varphi)$ et en prenant en compte les interférences correspondant au bon nombre quantique que l'on cherche à restaurer.

Le théorème de Noether relie une symétrie à la loi de conservation d'une observable. En fait, c'est cette loi qui est testée expérimentalement et les valeurs propres des observables associées définissent les nombres quantiques qui doivent être utilisés pour décrire le noyau. Dans le cas nucléaire, il existe un ensemble d'observables qui vérifient chacune une loi de conservation. Cela concerne

- la quantité de mouvement (\hat{p}) associée à l'invariance par translations dans \mathbb{R}^3 .
- le moment angulaire (\hat{L}) associé à l'invariance par rotations \mathbb{R}^3 .

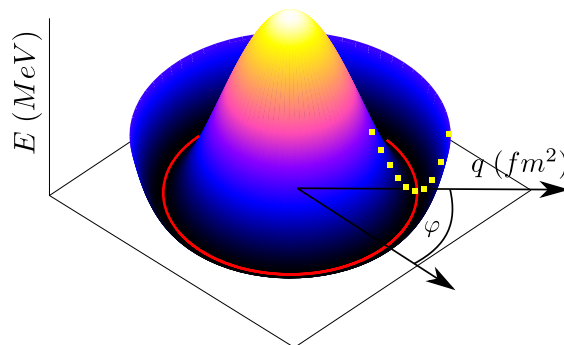


FIG. 2.7: Le potentiel dit "chapeau mexicain" est une illustration de la brisure spontanée de symétrie dans le cas d'un espace de jauge à une dimension. L'énergie du système est tracée en fonction d'un paramètre d'ordre q dans un espace de jauge où la dégénérescence est repérée par l'angle φ . Par analogie, la figure 2.5 correspond ici à un plan défini par $\varphi = \varphi_0$. Le cercle (rouge) au fond du puits de potentiel représente les états qui lorsqu'ils sont superposés, forment un ensemble respectant la symétrie de jauge. Les carrés (jaunes) indiquent les excitations de basse énergie qui apparaissent lors de la brisure de symétrie.

- la charge ($\hat{\tau}$) associée à l'invariance par rotations dans l'espace de l'isospin.
- la parité ($\hat{\pi}$) associée à l'invariance par rapport aux axes du repère du centre de masse.
- le nombre de particules (\hat{N}) associé à l'invariance par rotation dans $\mathcal{U}(1)$.

La symétrie impose qu'à tout ordre, les fluctuations associées à l'observable conservée doivent être nulles, ainsi pour la conservation du nombre quantique de particule on doit avoir $\langle (\Delta N)^k \rangle = 0$ pour tout k . Alors, la restauration d'une symétrie est généralement formulée en utilisant la notion de projection par rapport à l'observable qui lui est associée (cf. le théorème précédent). Par exemple, on définit un projecteur sur le nombre quantique de moment orbital total J par P^J ce qui donne le schéma suivant

$$P^J |\Psi\rangle \longrightarrow |\Psi^J\rangle, \quad (2.68)$$

Un exemple d'intérêt pour ce travail, est la projection associée à l'opérateur nombre de particules. On peut générer un ensemble d'états dégénérés ne respectant pas la symétrie de jauge $\mathcal{U}(1)$ associée à ce nombre quantique par l'opération

$$|\Psi(\varphi + \delta\varphi)\rangle = e^{i\delta\varphi\hat{N}} |\Psi(\varphi)\rangle. \quad (2.69)$$

L'opérateur $e^{i\delta\varphi\hat{N}}$ tourne l'état dans l'espace de jauge, il correspond à la solution de l'équation d'évolution $-i\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial\varphi} = \hat{N}|\Psi\rangle$ dont la solution statique nous assure que les fluctuations de \hat{N} sont nulles. On peut alors utiliser cette dernière pour rendre explicites les opérations de restauration de symétrie. Par exemple, pour la symétrie de jauge associée à \hat{N} , partant d'un état Ψ brisant le nombre de particules (un vide de quasi-particules par exemple), on peut construire un état Ψ^N ayant le bon nombre de particules avec

$$|\Psi^N\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\varphi(\hat{N}-N)} |\Psi\rangle, \quad (2.70)$$

où $e^{i\varphi N}$ apparaît alors comme un poids qui définit les interférences entre les états sous-jacents permettant ainsi de restaurer le nombre de particules. Ainsi, à partir d'une théorie utilisant des états ne possédant pas les bonnes symétries, il est possible de reconstruire l'état associé avec les symétries appropriées pour décrire la fonction d'onde nucléaire. La figure 2.7 représente le fameux chapeau mexicain qui illustre parfaitement le concept de brisure et de restauration de symétrie. Sur cette figure, on a représenté l'énergie (axe vertical) dans l'espace de jauge (plan horizontal). Le cercle (rouge) est la ligne représentant l'ensemble des états d'énergie minimum, ces états étant tous dégénérés. Lorsque la symétrie est brisée la fonction d'onde se localise en un point du cercle. Les carrés jaunes représentent un type d'excitation caractéristique de la brisure de symétrie. Ils ont été proposés par J. Goldstone[63]. Ce sont des excitations bosoniques, de basses énergies. Ces excitations peuvent être prises en compte en traitant les fluctuations quantiques associées au paramètre d'ordre dans le repère intrinsèque, et donc,

en pratique, en construisant une distribution sur l'axe radial de cette figure. Par exemple, les fluctuations quadrupolaires et octupolaires sont nécessaires pour décrire les noyaux le long de la carte nucléaire. Ces quantités sont observées expérimentalement ou influencent les résultats expérimentaux.

Ainsi une théorie nucléaire prédictive doit respecter les symétries microscopiques, inclure les fluctuations des observables collectives et décrire le repère intrinsèque qui peut être observé expérimentalement (par exemple fig. 2.4). Un cadre formel pour arriver à une telle théorie est de considérer dans un premier temps, une méthode brisant les symétries pour inclure l'appariement, les déformations... puis dans un second temps, de considérer la restauration de ces symétries.

2.2.2 Multi-reference energy density functional (MR-EDF)

Nous avons vu ci-dessus que la restauration de symétrie requiert de passer d'un seul état de référence à un état écrit comme une superposition d'états de référence (MR-EDF) tous dégénérés. La combinaison de EDF et d'état mélangé est hautement non triviale et conduit à sortir du cadre strict des théories DFT. De nouveau, en physique nucléaire, l'extension des méthodes SR-EDF a été fortement guidée par le cas Hamiltonien et plus particulièrement par la méthode des coordonnées génératrices (GCM) qui est discutée plus en détail ci-dessous[64–66].

2.2.2.1 Méthode des coordonnées génératrices (cas Hamiltonien)

La méthode de la coordonnée génératrice postule une fonction d'onde d'essai écrite comme une superposition d'états identifiés d'un paramètre q ,

$$|\Psi\rangle = \int dq f(q) |\Psi(q)\rangle, \quad (2.71)$$

où $\Psi(q)$ représente un état de simple référence et $f(q)$ définit le poids de chaque état $\Psi(q)$ dans le mélange. C'est une description adaptée au cas nucléaire. En effet, on peut choisir la variable q pour générer l'espace des phases des états intrinsèques $\Psi(q)$ mais aussi traiter les fluctuations des variables collectives telles que les déformations quadrupolaire et octupolaire. Dans le cas d'un Hamiltonien \hat{H} , l'énergie est alors exprimée en fonction des états de référence sous-jacents comme

$$E = \frac{\int dq dq' f^*(q) f(q') \langle \Psi(q) | \hat{H} | \Psi(q') \rangle}{\int dq dq' f^*(q) f(q') \langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle}. \quad (2.72)$$

Les poids peuvent être obtenus en minimisant l'énergie par rapport aux variations de la fonction de poids $f^*(q)$. Cela conduit à une équation du type

$$\int dq' f_k(q') \langle \Psi(q) | \hat{H} | \Psi(q') \rangle = E \int dq' f(q') \langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle, \quad (2.73)$$

qu'on appelle équation de Hill et Wheeler. Elle peut se résoudre en diagonalisant la matrice obtenue par discrétisation de l'intégrale.

La physique obtenue en résolvant l'équation de Hill et Wheeler dépend de l'espace collectif choisi, donc des variables collectives choisies pour le générer. En pratique dans la théorie MR-EDF, on utilise des vides de particules ou de quasi-particules pour décrire les états $\Psi(q)$, ce qui présente un grand avantage. En effet, les éléments de matrice $\langle \Psi(q) | \hat{H} | \Psi(q') \rangle$ peuvent alors être estimés grâce au théorème de Wick généralisé[67]. Ainsi, pour un Hamiltonien à deux corps on a

$$E(q, q') = \frac{\langle \Psi(q) | \hat{H} | \Psi(q') \rangle}{\langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle} = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ij}^{qq'} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{li}^{qq'} \rho_{kj}^{qq'} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{ij}^{q'q*} \kappa_{lk}^{qq'} , \quad (2.74)$$

où

$$\begin{aligned} \rho_{ji}^{qq'} &= \frac{\langle \Psi(q) | a_i^\dagger a_j | \Psi(q') \rangle}{\langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle} \\ \kappa_{ij}^{q'q*} &= \frac{\langle \Psi(q) | a_i^\dagger a_j^\dagger | \Psi(q') \rangle}{\langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle} , \end{aligned} \quad (2.75)$$

sont les densités normale et anormale de transition. L'énergie de l'état de multi-références est alors exprimée en fonction des "énergies" (complexes) $E(q, q')$ moyennées entre deux vides de quasi-particule,

$$E = \int dq dq' \mathcal{N}(q, q') E(q, q') , \quad (2.76)$$

où

$$\mathcal{N}(q, q') = \frac{f^*(q) f(q') \langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle}{\int dq dq' f^*(q) f(q') \langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle} , \quad (2.77)$$

donne une forme explicite de l'énergie GCM.

2.2.2.2 Mélange de configurations pour restaurer les bons nombres quantiques

La projection sur les bons nombres quantiques comme nous avons vu ci-avant, se fait grâce à l'introduction de projecteur. Par exemple la projection d'un état de qp Ψ sur le bon nombre de paires $N/2$ donne un état

$$|\Psi^N\rangle = P^N |\Psi\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\varphi(\hat{N}-N)} |\Psi\rangle , \quad (2.78)$$

où P^N dénote le projecteur sur le bon nombre de particules N . Si on prend un état de quasi-particules $|\Psi\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_i^\dagger) |-\rangle$, on obtient

$$|\Psi^N\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i\varphi N} \prod_{i>0} (u_i + v_i e^{2i\varphi} a_i^\dagger a_i^\dagger) |-\rangle , \quad (2.79)$$

où $\prod_{i>0} (u_i + v_i e^{2i\varphi} a_i^\dagger a_i^\dagger) |-\rangle$ correspond à un état de quasi-particules $\Psi(\varphi)$, tourné dans l'espace de jauge par rapport à l'état initial. On voit que la projection sur les bons nombres quantiques peut s'écrire comme un mélange de configurations (Eq. 2.71). L'angle de jauge φ joue alors le rôle de la coordonnée génératrice q et la fonction de distribution $f(\varphi)$ de l'équation (2.71) est donnée par⁴

$$f(\varphi) = \frac{1}{2\pi} e^{-i\varphi N} . \quad (2.80)$$

La projection revient à mélanger des états de référence avec des poids fixes. C'est pourquoi les différentes projections, sur le bon nombre de particules noté P^N , sur le moment angulaire total J noté P^J , peuvent être éventuellement combinées avec la GCM lorsqu'elle est appliquée à d'autres variables collectives dénotées q . Cela conduit à utiliser une fonction d'onde du type

$$|\Psi^{N,J}\rangle = \int dq f(q) P^J P^N |\Psi(q)\rangle . \quad (2.81)$$

Les états sous-jacents $\Psi(q)$ peuvent par exemple être obtenus avec la méthode de minimisation sous la contrainte q . L'application de la GCM définie par l'état collectif ci-dessus permet d'obtenir les différents états excités de nombre quantique N et J , tout en traitant les fluctuations associées à q . Dans l'application des méthodes de projection, on distingue deux sortes de raffinement, la projection après la variation (PAV) et la variation après la projection (VAP). Dans le premier cas, on construit un jeu d'états de référence $\{\Psi(q)\}$ qui sont gardés fixes par la suite. Cela conduit au schéma ci-dessous

$$E \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \xi (\langle \Psi | \hat{q} | \Psi \rangle - q) \xrightarrow[\frac{\delta E}{\delta \Psi} = 0]{} \Psi(q) \longrightarrow \Psi^{N,L}(q) \xrightarrow[\frac{\delta E}{\delta f(q)} = 0]{} \Psi^{N,L} , \quad (2.82)$$

où la notation $\delta E = 0$ correspond à l'application d'un principe variationnel soit sur les degrés de liberté de l'état intrinsèque $\Psi(q)$, soit sur ceux associés à la coordonnée génératrice q . Dans ce schéma la projection sur les bons nombres quantiques correspond à la méthode de projection après la variation (PAV) car l'étape de projection n'est pas variationnelle. On peut définir un schéma alternatif où l'énergie de l'état projeté est directement minimisée en faisant varier les états $\Psi(q)$ sous-jacents. Cela conduit à l'enchaînement

$$E \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \xi (\langle \Psi | \hat{q} | \Psi \rangle - q) \xrightarrow[\frac{\delta E}{\delta \Psi} = 0]{} \Psi(q) \xrightarrow[\frac{\delta E}{\delta \Psi} = 0]{} \Psi^{N,L}(q) \xrightarrow[\frac{\delta E}{\delta f(q)} = 0]{} \Psi^{N,L} . \quad (2.83)$$

On appelle cette méthode variation après la projection (VAP). Finalement, cette dernière est complémentaire de l'approche de la coordonnée génératrice puisque dans ce cas tous les degrés de liberté identifiés du problème tels que ceux associés aux nombres quantiques, ceux associés aux variables collectives q et les degrés de liberté interne de l'état de référence $\Psi(q)$, sont optimisés par le principe variationnel.

⁴Il est à noter que la méthode variationnelle (cf. section 2.2.2.1) peut être utilisée pour trouver l'expression des poids en notant que tous les états $\Psi(\varphi)$ sont des états dégénérés.

L'intérêt de la GCM est (1) de diagonaliser l'Hamiltonien nucléaire dans un espace collectif restreint et ainsi obtenir des états excités, (2) de traiter les fluctuations quantiques de certaines observables \hat{Q} du repère intrinsèque, en particulier celles susceptibles de décrire une transition de phase. En effet, les fluctuations d'une variable collective près d'une transition de phase sont importantes pour décrire les propriétés physiques du système.

2.2.2.3 Mélange de configurations dans la théorie EDF

L'utilisation du mélange de configurations dans une théorie nucléaire EDF a de nouveau été largement guidée par le cas Hamiltonien. La principale difficulté est de définir l'équivalent de l'élément de matrice $\langle \Psi(q) | \hat{H} | \Psi(q') \rangle / \langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle$ dans un cadre fonctionnel. Nous avons vu précédemment qu'au niveau SR-EDF, la fonctionnelle en énergie qui est associée à l'état de référence $\Psi(0)$ et est équivalente à $\langle \Psi(0) | \hat{H} | \Psi(0) \rangle / \langle \Psi(0) | \Psi(0) \rangle$, est donnée par l'expression fonctionnelle $\mathcal{E}[\hat{\rho}^1, \kappa]$ avec $\hat{\rho}^1$ et κ les matrices densités normale et anormale. La stratégie utilisée en MR-EDF est guidée par le théorème de Wick généralisé et consiste à directement remplacer $\langle \Psi(q) | \hat{H} | \Psi(q') \rangle / \langle \Psi(q) | \Psi(q') \rangle$ par $\mathcal{E}[\rho^{qq'}, \kappa^{qq'}]$ où \mathcal{E} est la fonctionnelle utilisée au niveau SR-EDF mais avec des dépendances fonctionnelles en $\rho^{qq'}$ et $\kappa^{qq'}$ qui sont les densités normale et anormale de transition définies par l'équation (2.75). Cette méthode a certains avantages. Tout d'abord, le cas Hamiltonien apparaît comme un cas particulier. De plus, on a naturellement la limite

$$\mathcal{E}[\rho^{qq'}, \kappa^{qq'}, \kappa^{q'q*}] \xrightarrow{q \rightarrow q'} \mathcal{E}[\hat{\rho}^{qq}, \kappa^{qq}], \quad (2.84)$$

où $\hat{\rho}^{qq}$ et κ^{qq} sont les densités normale et anormale associées à $\Psi(q)$, appelées $\hat{\rho}^1$ et κ ci-dessus. En utilisant cette stratégie, la méthode MR-EDF consiste donc désormais à utiliser un état intermédiaire mélangé dont l'énergie s'écrit comme

$$\mathcal{E}^{MR-EDF} = \int dq dq' \mathcal{N}(q, q') \mathcal{E}[\rho^{qq'}, \kappa^{qq'}, \kappa^{q'q*}]. \quad (2.85)$$

L'énergie multi-référence est alors une fonctionnelle des états (q, q') à travers leurs densités de transition. Ainsi, la méthode MR-EDF combine la puissance de l'approche fonctionnelle pour traiter les corrélations de milieu avec la méthode de la coordonnée génératrice qui permet de rendre compte des corrélations collectives de taille et de forme. En particulier, elle permet de décrire les états intrinsèques en même temps que l'état nucléaire avec les bons nombres quantiques. En effet, comme nous avons vu ci-dessus les projections sont obtenues simplement en considérant des poids fixes dans l'état MR-EDF. Un autre grand avantage de la formulation MR-EDF est de fournir les états excités. Par exemple, la figure 2.8 illustre les courbes d'énergie potentielle de ^{18}O qui sont tracées en utilisant la méthode MR-EDF combinée avec la GCM. Chaque courbe correspond à une courbe projetée sur les bons nombres quantiques

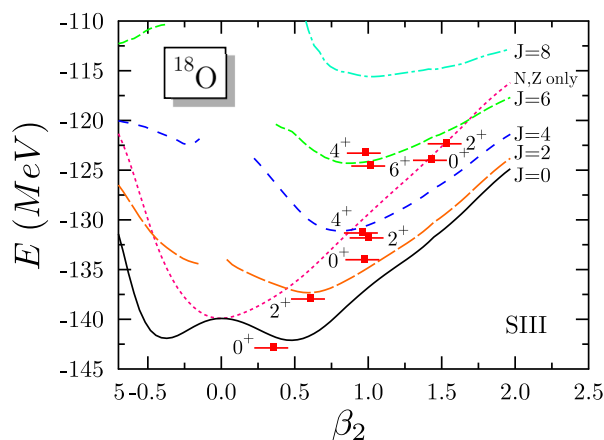


FIG. 2.8: Surfaces d'énergie potentielle de ^{18}O obtenues avec la méthode MR-EDF en projetant sur les bons nombres quantiques de particule et de moment angulaire total, où l'intégrale du mélange de configurations a été discrétisée sur 9 angles de jauge pour la restauration du nombre de particules et 9 angles d'Euler pour la restauration de la symétrie sphérique, les états excités de chaque bande d'Yrast calculés avec la GCM sont également indiqués. Cette figure est adaptée à partir de la référence [72].

de particule et de moment angulaire total[44, 68]. Les états excités de chaque bande d'Yrast qui correspond à un moment angulaire total donné, et qui sont obtenus à partir du mélange de configurations, sont indiqués par un trait et un point rouges.

Le mélange de configurations est un outil de choix pour obtenir (1) les états excités, (2) afin de connaître la déformation du repère intrinsèque qui leur est associée et donc de prédire les bandes rotationnelles observables expérimentalement. Les corrélations collectives qui sont incluses à l'aide du mélange de configurations permettent d'obtenir un très bon accord avec l'expérience, à titre d'exemples nous citons les références [69–71]. Il faut mettre au crédit de la méthode MR-EDF la possibilité d'étudier des noyaux lourds, de prédire les observables expérimentales et surtout les états excités nucléaires.

2.3 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre l'historique et les concepts clés de la théorie EDF. La méthode EDF traite les corrélations en deux étapes, le premier niveau appelé SR-EDF, traite les corrélations de courte et longue portée à l'aide d'une interaction effective (Skyrme ou Gogny) et prédit le plus exactement possible l'énergie du noyau ainsi que sa densité locale. Ces corrélations sont présentes tout le long de la charte des noyaux jusque dans la matière nucléaire infinie et sont prises en compte par des dépendances en courant et en densité dans l'énergie fonctionnelle. Au niveau SR-EDF, il existe une fonction d'onde de référence qui peut être un vide de particules ou de quasi-particules, ce dernier prend en compte les corrélations d'appariement très dépendantes du nombre de neutrons et protons. Quant au second niveau, le MR-EDF, il est fortement guidé par le mélange de configurations du cas Hamiltonien. Il permet (i) d'inclure les corrections dues aux symétries en projetant l'état SR-EDF sur les bons nombres quantiques

nucléaires (ii) de rendre compte des fluctuations quantiques d'observables qui dans le repère attaché au noyau peuvent subir une transition de phase (ex. la déformation quadrupolaire, octupolaire), de façon générale des corrélations collectives très dépendantes du nombre de protons et neutrons (iii) de prédire la spectroscopie nucléaire avec les bons nombres quantiques associés et les bandes vibrationnelles ou rotationnelles.

Alors que la connexion avec la DFT est assez claire au niveau SR-EDF, l'extension de cette théorie au mélange de configurations est plus subtile. L'utilisation d'état de référence mélangé associé à des énergies écrites comme $\mathcal{E}[\rho^{qq'}, \kappa^{qq'}]$, fonctionnelles des états de transition, paraît difficile à concilier avec une approche DFT où la notion d'un état de simple référence est utilisée pour construire la fonctionnelle en densité. Nous allons voir par la suite que (a) l'utilisation directe de l'équation 2.85 conduit à des soucis importants quant à l'utilisation des méthodes MR-EDF (b). Au-delà de ces problèmes, les fondements mêmes de la théorie MR-EDF sont remis en cause. Cependant, nous verrons que dans certains cas il est possible de montrer que les calculs MR-EDF ont une interprétation DFT, restaurant ainsi la notion d'état de référence pour construire les dépendances en densité de l'énergie.

La méthode MR-EDF corrigée et son interprétation fonctionnelle

Résumé :

L'apparition de divergences et de sauts dans les énergies MR-EDF a récemment attiré l'attention de la communauté. Nous rappelons ici les résultats des travaux qui ont permis d'identifier les origines exactes des pathologies qui apparaissent lorsqu'on combine la théorie fonctionnelle et le mélange de configurations telle que dans la méthode MR-EDF. Il est montré que la régularisation proposée dans [5, 73, 74] peut être réinterprétée dans le cadre des théories fonctionnelles, toutefois l'EDF équivalente dépend alors de l'état projeté et de l'état du repère intrinsèque. Une modification de la correction est proposée pour pouvoir identifier l'énergie MR-EDF à une fonctionnelle de l'état projeté seulement. Cela permet par la suite de redéfinir un niveau SR-EDF qui inclut la brisure puis la restauration de symétrie dans une seule fonctionnelle, appelé SC-EDF ("Symmetry conserved EDF").

Sommaire

3.1	Analyse critique des méthodes MR-EDF	45
3.1.1	Présentation des difficultés dans le cas de la projection sur le bon nombre de particules	45
3.1.2	Solution minimale au problème de divergence et de saut	49
3.1.3	Recombinaison Hamiltonienne et discussion	52
	La recombinaison dans le cas SR-EDF	53
	Quelques remarques complémentaires	54

3.2	Interprétation fonctionnelle de la régularisation MR-EDF dans le cas de la restauration du nombre de particules	55
3.2.1	Le cas Hamiltonien	55
3.2.2	Le cas MR-EDF	57
	Analyse critique des corrections aux théories MR-EDF	58
3.3	Vers une théorie fonctionnelle combinant simultanément la brisure et la restauration de symétrie	62
3.3.1	Règles de construction d'une théorie SC-EDF guidée par le cas Hamiltonien	64
3.3.2	Application de la théorie SC-EDF restaurant le nombre quantique de particule à des fonctionnelles ayant une dépendance non entière de la densité .	65
3.4	Conclusion	67

3.1 Analyse critique des méthodes MR-EDF

Récemment, un certain nombre de difficultés ont été observées dans l'application conjointe des méthodes liées au mélange de configurations et à la théorie EDF[4, 5, 73–75]. Ces problèmes ont révélés que la méthode MR-EDF qui repose sur l'extension des méthodes fonctionnelles dans une théorie de mélange de configurations et/ou restauration de bons nombres quantiques, repose sur des bases théoriques fragiles qui restent à clarifier. Dans ce chapitre, un résumé des analyses critiques qui ont été faites sur les difficultés observées lors de l'application de la théorie MR-EDF ainsi que les solutions récemment apportées sont discutées. Nous verrons en quoi ces difficultés posent des contraintes sur la construction fonctionnelle de l'état SR-EDF. Dans cette thèse, nous nous sommes plus particulièrement intéressés au problème de l'appariement et à la restauration du bon nombre de particules, c'est pourquoi, bien que les analyses ont été faites de manière générale, elles sont présentées ici plus en détails.

3.1.1 Présentation des difficultés dans le cas de la projection sur le bon nombre de particules

La restauration du bon nombre de particules (PNR pour "particle number restoration") est un cas particulier de la théorie MR-EDF où les poids du mélange sont fixés (Eq. 2.80). Dans ce chapitre, nous nous plaçons dans le cas où l'application de la PNR correspond à une théorie PAV, c'est-à-dire où la projection est appliquée à un état sous-jacent SR-EDF sans une optimisation à posteriori par un principe variationnel (cf. section 2.2.2.2). Dans le cas où seule la projection d'un état de vide de quasi-particules Ψ est réalisée, l'état obtenu par la projection est donné par l'Eq. (2.78) et l'énergie MR-EDF s'écrit [76–81]

$$\mathcal{E}^{MR-EDF} = \int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \mathcal{E}[\rho^{0\varphi}, \kappa^{0\varphi}, \kappa^{\varphi 0*}]. \quad (3.1)$$

Cela correspond à un cas particulier de l'équation (2.76) où on a utilisé l'expression suivante

$$\mathcal{N}(0, \varphi) = \frac{\langle \Psi(0) | \Psi(\varphi) \rangle}{\int_0^{2\pi} d\varphi' e^{-i\varphi' N} \langle \Psi(0) | \Psi(\varphi') \rangle} e^{-i\varphi N}, \quad (3.2)$$

qui comprend le poids du mélange (au numérateur) et la norme de l'état projeté (au dénominateur). Dans la méthode EDF, des vides de particules ou de quasi-particules sont utilisés en tant qu'état de simple référence Ψ . Les états de transition $\Psi(\varphi)$ sont définis à partir de l'état de référence par une rotation dans l'espace de jauge et forment un ensemble d'états dégénérés. Au niveau MR-EDF, le cas Hamiltonien et l'utilisation du théorème de Wick généralisé permet d'être guidé pour de supposer une forme pour les énergies $\mathcal{E}[\rho^{0\varphi}, \kappa^{0\varphi}]$ entrant dans l'Eq. (3.1). Ainsi, ces énergies apparaissent comme

une extension de la fonctionnelle définie pour un état de référence SR-EDF mais évaluée sur l'ensemble des densités de transition entre l'état de départ $\Psi(0)$ et l'état tourné $\Psi(\varphi)$. Ces densités sont ici notées $\rho^{0\varphi}$ et $\kappa^{0\varphi}$. Si on a supposé que l'état de départ est écrit dans la base canonique de sa densité à un corps, qui correspond ici à l'ensemble d'états à un corps $\{\psi_i\}$ associé aux opérateurs de création $\{a_i^\dagger\}$, alors un vide de quasi-particules s'exprime par

$$|\Psi(0)\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_i^\dagger) |-\rangle, \quad (3.3)$$

et correspond lorsqu'il est tourné de l'angle de jauge φ , à

$$|\Psi(\varphi)\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i e^{2i\varphi} a_i^\dagger a_i^\dagger) |-\rangle. \quad (3.4)$$

Le recouvrement entre ces deux état devient

$$\langle \Psi(0) | \Psi(\varphi) \rangle = \prod_{i>0} (u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi}), \quad (3.5)$$

Finalement, dans la base canonique de la densité à un corps de départ, les densités locales normale et anormale de transition sont données par (cf. équation 2.75)

$$\begin{aligned} \rho_{ii}^{0\varphi} &= \sum_i \frac{v_i^2}{(u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})} e^{2i\varphi}, \\ \kappa_{ii}^{0\varphi} &= \sum_i \frac{v_i u_i}{(u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})} e^{2i\varphi}, \\ \kappa_{ii}^{\varphi 0*} &= \sum_i \frac{v_i u_i}{(u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

L'énergie PAV projetée peut être obtenue en utilisant des interactions effectives (par exemple celle donnée par les Eqs. (2.56) et (2.64)) qui définissent les énergies SR-EDF de transition entrant dans l'intégrant de l'Eq. (3.1).

En pratique, afin de réaliser la projection, il est nécessaire de discrétiser l'intégrale sur les angles de jauge. La méthode, appelée méthode de Fomenko, est le plus souvent utilisée. Elle consiste à utiliser la formule

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \mathcal{E}[\rho^{0\varphi}, \kappa^{0\varphi}, \kappa^{\varphi 0*}] \longrightarrow \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \mathcal{N}(0, \frac{i\pi}{L}) \mathcal{E}\left[\rho^{0\frac{i\pi}{L}}, \kappa^{0\frac{i\pi}{L}}, \kappa^{\frac{i\pi}{L} 0*}\right], \quad (3.7)$$

où L correspond au nombre de points de discrétisation. Le cadre inférieur de la figure 3.1 présente les courbes d'énergie potentielle projetées en fonction du paramètre de déformation β_2 pour le noyau ^{18}O . Ces courbes été obtenues en utilisant le programme standard de Bender et Heenen[74]. Pour tracer ces PES, les auteurs de la référence[74] ont utilisés la méthode MR-EDF décrite ci-dessus. Les états de simple-référence sont construits à partir d'une fonctionnelle possédant deux composantes,

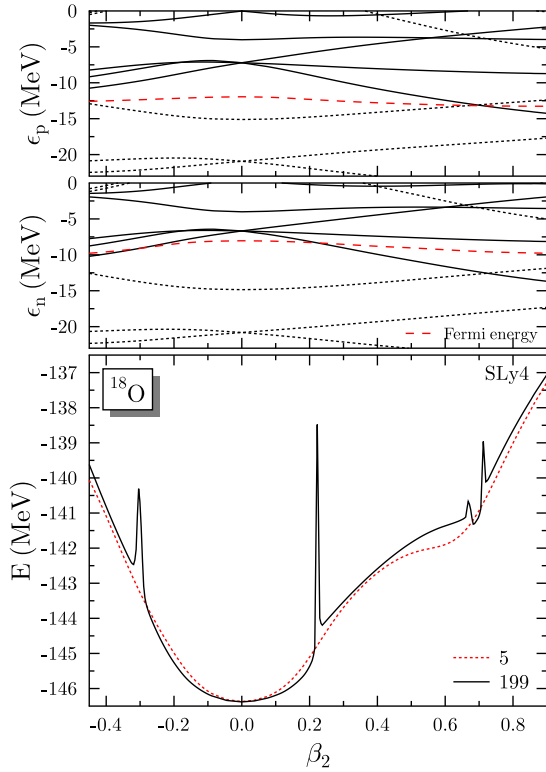


FIG. 3.1: (bas) La courbe d'énergie potentielle de ^{18}O projetée sur le bon nombre de particules est tracée en fonction du paramètre de déformation β_2 défini par Eq. (2.67). L'énergie multi-référence est calculée avec les contributions à l'énergie SR-EDF de type SLy4 et avec la forme fonctionnelle (2.65) et (2.64) pour la composante d'appariement. L'évolution des énergies des états à un corps proton (haut) et neutron (milieu) est présentée dans le panneau supérieur en fonction du même paramètre de déformation β_2 . Le nombre de points utilisé pour obtenir la PES (panneau inférieur) dans la discrétisation de Fomenko est 5 (ligne pointillée) points et 199 (ligne continue) points. On remarque la présence de divergences lorsque les énergies à un corps croisent le niveau de Fermi, elles sont de plus en plus visibles lorsqu'on augmente la discrétisation du réseau. Cette figure est adaptée de la référence [74].

une composante de champ moyen $\mathcal{E}^{\rho\rho} [\rho^{0\varphi}]$ et une composante pour les corrélations d'appariement $\mathcal{E}^{\kappa\kappa} [\kappa^{\varphi 0*}, \kappa^{0\varphi}]$, respectivement de type SLy4 et la forme fonctionnelle définie par les équations (2.65) et (2.64).

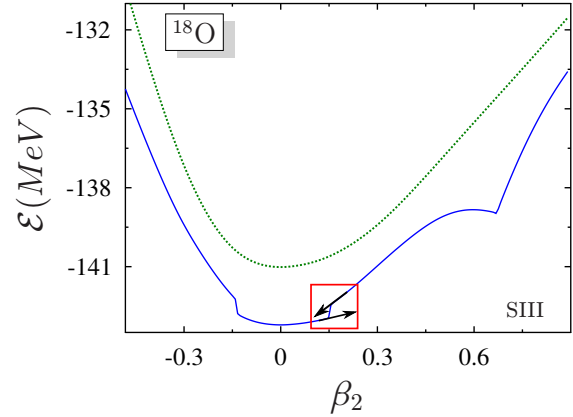
La figure 3.1 montre l'évolution des courbes d'énergie projetées en fonction du nombre de point L de la méthode de Fomenko, pour $L = 5$ (ligne pointillée) et $L = 199$ (ligne continue). On remarque que plus la discrétisation de l'intégrale de jauge est fine, plus des divergences sont visibles. Dans le panneau supérieur, l'évolution des énergies des états à un corps est tracée en fonction de β_2 , on voit que les divergences observées dans les PES correspondent au cas où une des énergies des états à un corps croise le niveau de Fermi. Ces divergences qui ne sont pas observées dans le cadre d'une théorie Hamiltonienne[75], sont donc spécifiques à l'utilisation d'une théorie fonctionnelle et ne proviennent pas d'un problème numérique. En effet, la discrétisation de Fomenko doit converger lorsque le paramètre L augmente, ce qui n'est pas vérifié sur cette figure.

Un autre exemple de ce type de problème est donné dans le cas où la paramétrisation SIII de la force de Skyrme est utilisée. Une de ses propriétés est de n'utiliser que des puissances entières de la densité ρ (i.e. $\alpha = 1$ dans l'énergie de l'Eq. 2.56). Dans la figure 3.2 les courbes d'énergie potentielle sont

représentés en fonction de β_2 au niveau SR-EDF avant la projection et après la projection avec la théorie MR-EDF en utilisant 199 points dans la discrétisation de Fomenko. On voit dans le cas de SIII que contrairement à la paramétrisation SLy4 qui contient des puissances non entières de la densité, la PES ne présente pas de divergences mais des discontinuités telle que celle illustrée dans l'encadré rouge, montrant ainsi que l'énergie n'est continue que par morceaux. Une analyse fine de la figure 3.1 montre que non seulement la PES révèle des divergences mais que au voisinage de ces dernières des sauts sont également identifiables. Ces sauts mettent en doute la validité des calculs MR-EDF non seulement aux points divergents mais aussi en dehors. On peut donc conclure que les problèmes de régularité sont spécifiques à la théorie MR-EDF et ce, a priori quel que soit le type de fonctionnelle utilisé pour définir l'état sous-jacent SR-EDF.

Ces observations ont été le point de départ d'un certain nombre de discussions et ne font que mettre

FIG. 3.2: Les courbes d'énergie potentielle de ^{18}O sont tracées en fonction du paramètre de déformation quadrupolaire avec la paramétrisation SIII de la force de Skyrme. La PES obtenue au niveau SR-EDF (ligne pointillé verte) est comparée avec la méthode MR-EDF utilisée ici pour restaurer le bon nombre de particules (ligne continue bleue). Le carré rouge et les flèches noires illustrent un des sauts qui apparaissent dans les PES MR-EDF. Pour la méthode de multi-références, la discrétisation de Fomenko a été réalisée avec 199 points.



en évidence le problème de fond associé à l'extension des théories EDF au mélange de configurations. Dans un premier temps, la présence de divergences a été discutée de manière empirique, il est ressorti de ces discussions que

- Les divergences peuvent apparaître lorsqu'une énergie de simple particule (neutron ou proton) croise le niveau de Fermi[75] (cf. figure 3.1).
- Si la fonctionnelle sous-jacente n'a pas de dépendance en densité et que la même interaction est utilisée dans ses deux composantes respectivement de corrélation particule-trou et particule-particule tout en étant complètement antisymétrisée, alors les divergences n'apparaissent pas dans les PES[69, 70, 82]. Il est à noter que cela revient à traiter un cas Hamiltonien.
- Une analyse [4] de l'intégration dans le plan complexe nécessaire pour exprimer l'énergie projetée (Eq. 3.1), a montré que la dépendance en densité non entière dans l'énergie $\mathcal{E}(0, \varphi)$ explique l'apparition de divergences dans les courbes d'énergie potentielle. On montre que de telles fonc-

tionnelles sont mal définies dans le plan complexe et ne peuvent être utilisées en PNR. Ces travaux apportent une contrainte importante pour l'expression de la fonctionnelle utilisable au niveau MR-EDF. En effet, jusqu'à maintenant quasiment toutes les fonctionnelles SR-EDF de type Skyrme ou Gogny utilisaient une dépendance en densité non entière.

- Le problème présenté ci-dessus n'est pas restrictif à la restauration du nombre de particules, par exemple les auteurs de la référence [83] ont montrés qu'il apparaissait également lors de la restauration du moment orbital total.
- Enfin, une première étude dans le cas PNR a montré que si on pouvait éviter d'utiliser le théorème de Wick généralisé, alors on obtient une PES parfaitement régulière[84]. Cette étude a motivée la recherche d'une solution générale à ce problème, pouvant s'appliquer à tout type de mélange de configurations[5, 73, 74].

Ces études préliminaires montrent que les soucis apparaissent uniquement parce qu'on combine le mélange de configurations et la théorie de la fonctionnelle en densité (le cas Hamiltonien étant une limite où il n'y a pas de problème). Elle montre aussi que la stratégie même, guidée par le théorème de Wick généralisé utilisé pour étendre la méthode SR-EDF à MR-EDF, doit être utilisée avec précaution.

3.1.2 Solution minimale au problème de divergence et de saut

Afin de trouver une solution aux problèmes observés dans les calculs MR-EDF, il fallait tout d'abord identifier leur origine. Pour cela, considérons ici le cas d'une fonctionnelle bilinéaire donnée par

$$\mathcal{E}(0, \varphi) = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^{0\varphi} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{li}^{0\varphi} \rho_{kj}^{0\varphi} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{ij}^{\varphi 0*} \kappa_{lk}^{0\varphi}, \quad (3.8)$$

où les vertex de l'interaction sont supposés indépendants des densités. Il est possible d'identifier plus facilement la source des problèmes dans la base canonique de l'état de quasi-particule $\Psi(0)$ Eq. (3.3). Nous ne présentons ici que le cas de la PNR, toutefois les conclusions qui suivront peuvent être généralisées à une base quelconque avec un vide HFB et à tout type de mélange de configurations. L'énergie définie ci-dessus est une fonctionnelle des densités normale et anormale de transition[80, 81] dont les expressions formelles, dans le cas BCS, sont données par les équations (3.6). On voit en particulier que pour

$$u_k^2 = v_k^2 = \frac{1}{2} \quad \text{et} \quad \varphi = \frac{\pi}{2}, \quad (3.9)$$

les densités normale et anormale divergent car leurs dénominateurs s'annulent ($u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi} = 0$) alors que leurs numérateurs sont strictement positifs. Donc, individuellement, $\rho^{0\varphi}$, $\kappa^{0\varphi}$ et $\kappa^{\varphi 0*}$ peuvent diverger. On remarque que cette condition correspond à l'observation faite avec la figure 3.1 où les divergences apparaissent lorsqu'une énergie simple particule croise le niveau de Fermi dans ce cas, on a

effectivement

$$\varepsilon_i = \lambda \implies v_i^2 = \frac{1}{2}, \quad (3.10)$$

où ε_i est une énergie simple particule et λ l'énergie de Fermi. Toutefois, l'énergie ne diverge pas automatiquement. A cause du recouvrement $\langle \Psi(0) | \Psi(\varphi) \rangle$ qui rentre dans l'expression de $\mathcal{N}(0, \varphi)$ et s'écrit comme $\prod_{i>0} (u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})$, la présence d'un seul dénominateur $1/(u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})$ ne peut faire diverger l'énergie lorsqu'il est multiplié par $\mathcal{N}(0, \varphi)$. Par exemple, $\mathcal{N}(0, \varphi) \rho_{ii}$ ou $\mathcal{N}(0, \varphi) \kappa_{i\bar{i}}$ sont des fonctions régulières, en tout point. Les seules éventualités où il peut y avoir des contributions divergentes correspondent à des cas où on a

$$\frac{1}{(u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})^n}, \quad (3.11)$$

avec $n \geq 2$ au dénominateur. Si on part de la forme bilinéaire Eq. (3.8), on peut avoir des termes du type $\mathcal{N}(0, \varphi) \rho_{ii} \rho_{ii}$ ou des termes $\mathcal{N}(0, \varphi) \kappa_{i\bar{i}} \kappa_{\bar{i}i}$. Ainsi un dénominateur du type de l'Eq. (3.11) ne peut intervenir qu'avec les contributions $i = j$ ou $\bar{i} = j$.

Dans ce canal, cela revient à enlever la self-interaction, c'est-à-dire le fait qu'une particule peut interagir avec elle-même. Par exemple, ce sont des contributions du type de $\langle a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i \rangle$ qui lorsque la self-interaction est traitée, sont nulles puisque $(a_i)^2 = 0$. Ce phénomène est bien connu en matière condensée[85].

Une méthode directe pour éliminer les problèmes consisterait donc à enlever la contribution de self-interaction dans l'intégrant de l'énergie MR-EDF. Une des difficultés est que cela revient à corriger le cas de simple référence, et obligerait alors à repenser le niveau SR-EDF complètement[4, 73]. Ainsi, la stratégie qui a été utilisée consiste à enlever la contribution à l'énergie des termes divergents sans modifier la fonctionnelle SR-EDF sous-jacente. Ceci peut se faire en écrivant tout d'abord les densités de transition comme

$$\begin{aligned} \rho_{ji}^{0\varphi} &= \rho_{ji}^{00} + \delta \rho_{ji}[\varphi], \\ \kappa_{lk}^{0\varphi} &= \kappa_{lk}^{00} + \delta \kappa_{lk}[\varphi], \\ \kappa_{ij}^{\varphi 0*} &= \kappa_{ij}^{00*} + \delta \kappa_{ij}^*[\varphi], \end{aligned} \quad (3.12)$$

où $\hat{\rho}^{00}$ et κ^{00} sont respectivement les densités normale et anormale de l'état de référence $\Psi(0)$. Les expressions des différences entre les densités de transition et celles de référence sont données, dans le

cas BCS, par

$$\begin{aligned}\delta\rho_{ii}[\varphi] &= \sum_i \frac{v_i^2 u_i^2}{(u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})} (e^{2i\varphi} - 1) , \\ \delta\kappa_{ii}[\varphi] &= \sum_i \frac{v_i u_i^3 (e^{2i\varphi} - 1)}{(u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})} , \\ \delta\kappa_{ii}^*[\varphi] &= \sum_i \frac{v_i^3 u_i (1 - e^{2i\varphi})}{(u_i^2 + v_i^2 e^{2i\varphi})} .\end{aligned}\quad (3.13)$$

Ces nouvelles quantités $\delta\rho_{ji}[\varphi]$, $\delta\kappa_{lk}[\varphi]$ et $\delta\kappa_{ij}^*[\varphi]$ (Eq. 3.12) contiennent complètement la composante divergente initialement présente dans les densités de transition. En effet dans leurs expressions ci-dessus, on voit qu'elles incluent le terme dangereux au dénominateur. Quant aux densités de référence ρ_{ji}^{00} , κ_{lk}^{00} et κ_{ji}^{00*} , elles ne présentent aucune divergences possibles. En reportant les équations (3.12) et (3.13) respectivement dans les Eqs. (2.56) et (2.64), on obtient les composantes de corrélation particule-trou et particule-particule de la fonctionnelle respectivement exprimées par

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^{\rho\rho}[\rho^0\varphi] &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} \rho_{ii}^{00} \rho_{jj}^{00} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} (\rho_{ii}^{00} \delta\rho_{jj}[\varphi] + \rho_{jj}^{00} \delta\rho_{ii}[\varphi]) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} \delta\rho_{ii}[\varphi] \delta\rho_{jj}[\varphi] ,\end{aligned}\quad (3.14)$$

et

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^{\kappa\kappa}[\kappa^0\varphi, \kappa^0\varphi^*] &= \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\kappa\kappa} \kappa_{ii}^{00*} \kappa_{jj}^{00} + \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\kappa\kappa} (\kappa_{ii}^{00*} \delta\kappa_{jj}[\varphi] + \kappa_{jj}^{00} \delta\kappa_{ii}^*[\varphi]) \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\kappa\kappa} \delta\kappa_{ii}^*[\varphi] \delta\kappa_{jj}[\varphi] .\end{aligned}\quad (3.15)$$

Dans ces expressions, seul le dernier terme peut diverger lorsqu'il est multiplié par $\langle \Psi(0) | \Psi(\varphi) \rangle$. La solution proposée qui est appelée ci-dessous régularisation des théories MR-EDF, consiste donc à enlever à la main dans chaque canal de self-interaction les éléments divergeants. Ils sont repérés dans les deux équations ci-dessus par la contribution des $\delta\rho_{ii}[\varphi] \delta\rho_{ii}[\varphi]$ et des $\delta\kappa_{ii}^*[\varphi] \delta\kappa_{ii}[\varphi]$ à l'énergie totale qu'on identifie finalement par,

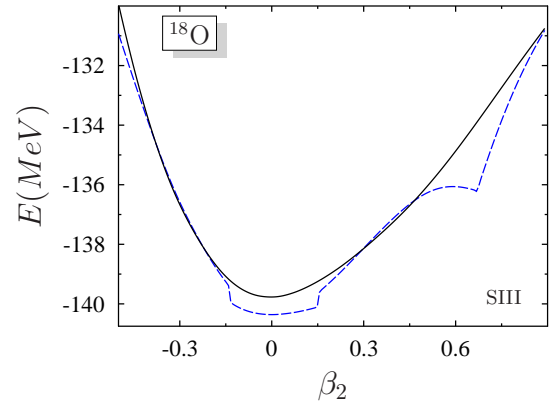
$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{CG}^N &= \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iiii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{iiii}^{\rho\rho}) \delta\rho_{ii}[\varphi] \delta\rho_{ii}[\varphi] - \bar{v}_{iiii}^{\kappa\kappa} \delta\kappa_{ii}^*[\varphi] \delta\kappa_{ii}[\varphi] , \\ &= \frac{1}{2} \sum_i [(\bar{v}_{iiii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{iiii}^{\rho\rho}) - \bar{v}_{iiii}^{\kappa\kappa}] (u_i v_i)^4 \int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \frac{(e^{2i\varphi} - 1)^2}{(u_i^2 + v_i^2 e^{-2i\varphi})^2} .\end{aligned}\quad (3.16)$$

Cette contribution doit être retranchée à l'énergie MR-EDF pour obtenir une énergie régularisée. On a alors

$$\mathcal{E}^{MR-EDF} \longrightarrow \mathcal{E}^{MR-EDF} - \mathcal{E}_{CG}^N ,\quad (3.17)$$

qui définit finalement la méthode MR-EDF régularisée. La figure 3.3 est une illustration des résultats régularisés[74]. La courbe d'énergie potentielle projetée sur le bon nombre de particules de ^{18}O est tracée en fonction du paramètre de déformation β_2 . Les énergies projetées sont obtenues soit avec un calcul MR-EDF régularisé (ligne continue noire) soit avec un calcul MR-EDF non régularisé (ligne pointillée bleue). La fonctionnelle SR-EDF utilisée dans le canal particule-trou est de type SIII (Skyrme) qui n'a pas de dépendance en densité non entière, et est complétée par une interaction d'appariement de contact (Eq. 2.65). $L = 199$ points sont utilisés pour la discrétisation de Fomenko du calcul MR-EDF. On voit sur cette figure que la PES obtenue à partir de la méthode MR-EDF régularisée n'a ni divergences ni sauts, pour une discrétisation très fine où précédemment les pathologies étaient très visibles. On montre également que la méthode de Fomenko converge (rapidement) avec le nombre de point L et devient indépendante de L pour $L \geq 5$.

FIG. 3.3: La courbe d'énergie potentielle projetée sur le bon nombre de particules de ^{18}O tracée en fonction du paramètre de déformation quadrupolaire β_2 (Eq. 2.67) est obtenue avec un calcul MR-EDF régularisé (ligne continue noire) ou non régularisé (ligne pointillée bleue). La fonctionnelle SR-EDF utilisée dans le canal particule-trou est de type SIII (Skyrme) complétée par une interaction d'appariement de contact. $L = 199$ points sont utilisés pour la discrétisation de Fomenko du calcul intégral MR-EDF.



3.1.3 Recombinaison Hamiltonienne et discussion

Dans la discussion des pathologies et leur solution, à aucun moment nous avons explicité pourquoi, dans le cas Hamiltonien, aucun problème n'est observé. Dans ce cas, les interactions dans les deux canaux particule-trou et particule-particule sont égales,

$$\bar{v}^{\rho\rho} = \bar{v}^{\kappa\kappa} = \bar{v} . \quad (3.18)$$

De plus, contrairement à une théorie EDF, l'antisymétrisation est entièrement prise en compte dans le cas Hamiltonien, c'est-à-dire $\bar{v}_{iii} = 0$. L'équation (3.16) devient alors

$$\mathcal{E}_{CG}^N(0, \varphi) = \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}} (\delta\rho_{ii}[\varphi] \delta\rho_{ii}[\varphi] + \delta\kappa_{i\bar{i}}^*[\varphi] \delta\kappa_{i\bar{i}}[\varphi]) . \quad (3.19)$$

En utilisant les expressions de $\delta\rho_{ii}[\varphi]$, $\delta\kappa_{ii}^*[\varphi]$ et $\delta\kappa_{ii}[\varphi]$, on voit que

$$\delta\rho_{ii}[\varphi] \delta\rho_{ii}[\varphi] = -\delta\kappa_{ii}^*[\varphi] \delta\kappa_{ii}[\varphi] . \quad (3.20)$$

Donc, dans le cas Hamiltonien, les composantes pouvant éventuellement diverger séparément se recombinaient pour donner 0. En pratique, les valeurs des corrections sont grandes mais s'annulent grâce à la recombinaison entre les canaux de particule-trou et particule-particule (ci-dessus). Ainsi dans le cas Hamiltonien, les termes du canal particule-trou et du canal particule-particule qui pris séparément divergent, se compensent exactement et conduisent à une énergie régulière en tout point. Dans les théories fonctionnelles, le fait de prendre des interactions $\bar{v}^{\rho\rho}$ et $\bar{v}^{\kappa\kappa}$ différentes empêche cette recombinaison. La méthode proposée pour régulariser l'énergie consiste à enlever les parties divergentes prises séparément dans les deux canaux. En particulier, cela explique pourquoi lorsque la fonctionnelle sous-jacente n'a pas de dépendance en densité et que la même interaction est utilisée dans ses deux composantes, tout en imposant exactement l'antisymétrisation, on obtient des énergies projetées régulières.

La recombinaison dans le cas SR-EDF :

On peut également remarquer que la notion de recombinaison existe lors de la construction de la fonctionnelle SR-EDF[74, 86]. En effet, le canal de self-interaction est commun à $\mathcal{E}^{\rho\rho}[\hat{\rho}^1]$ et $\mathcal{E}^{\kappa\kappa}[\kappa, \kappa^*]$, par exemple, les termes en question dans le cas d'une fonctionnelle bilinéaire obtenue à partir d'une théorie BCS sont

$$\mathcal{E}^{\rho\rho}[\hat{\rho}^1] + \mathcal{E}^{\kappa\kappa}[\kappa, \kappa^*] \longrightarrow \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{iii}^{\rho\rho}) v_i^4 + \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{iii}^{\kappa\kappa} v_i^2 (1 - v_i^2) , \quad (3.21)$$

où nous avons retiré les éléments n'intervenant pas dans la recombinaison. On remarque que dans le cas purement Hamiltonien où $\bar{v}_{iii}^{\rho\rho} = \bar{v}_{iii}^{\kappa\kappa} = \bar{v}$ et $\bar{v}_{iii} = 0$, on a dans les sommes ci-dessus l'identité suivante

$$v_i^2 = v_i^4 + v_i^2 (1 - v_i^2) . \quad (3.22)$$

Ainsi, le choix de poser v_i^4 dans la fonctionnelle $\mathcal{E}[\hat{\rho}^1]$ et $v_i^2 (1 - v_i^2)$ dans celle des corrélations $\mathcal{E}[\kappa, \kappa^*]$ semble arbitraire d'un point de vue Hamiltonien. En fait, il a été guidé par la limite HF qui correspond à v_i^4 ce qui permet de reconnaître au niveau SR-EDF

$$\mathcal{E}^{\rho\rho}[\hat{\rho}^1] + \mathcal{E}^{\kappa\kappa}[\kappa, \kappa^*] \xrightarrow{HF} \mathcal{E}[\hat{\rho}^1] . \quad (3.23)$$

Cependant le choix qui est fait de définir la fonctionnelle SR-EDF avec $\bar{v}^{\kappa\kappa} \neq \bar{v}^{\rho\rho}$, brise la recombinaison Hamiltonienne et entraîne a fortiori les problèmes que nous avons identifiés lors du passage à la description MR-EDF. Toutefois, il faut noter que dans le cadre de la DFT, briser la recombinaison est tout à fait possible et apparaît même comme une flexibilité de cette théorie.

Quelques remarques complémentaires :

- La régularisation a été introduite ici dans le cas particulier de la fonctionnelle bilinéaire (3.8), en identifiant les termes divergents de façon empirique. Cette fonctionnelle correspond à un cas particulier où la base des états à un corps est choisie de façon unique, elle diagonalise $\hat{\rho}^1$.
- La méthode présentée ici que nous avons justifiée par l'expression des matrices densités de transition, peut paraître empirique. Toutefois, elle repose sur une justification beaucoup plus profonde. Dans la référence [5], les énergies $\mathcal{E}[\rho^{0\varphi}, \kappa^{0\varphi}, \kappa^{\varphi 0*}]$ ont été calculées, dans le cas Hamiltonien, en utilisant le théorème de Wick normal (SWT) au lieu du théorème de Wick généralisé (GWT). Il a été montré que les termes pathologiques n'apparaissent pas si on utilise le SWT, contrairement à l'expression de l'énergie dérivée du GWT où on retrouve explicitement des contributions spurieuses en étant toutefois censées se recombinaison. Ainsi, l'énergie régularisée dans le cas EDF peut directement être vue comme une extension du cas Hamiltonien basé sur le SWT et non le GWT. Comme précisé en introduction de cette section, cette régularisation est alors générale à tout type de projection et/ou de mélange de configurations.
- La régularisation corrige non seulement des divergences observées dans les PES mais aussi des sauts.
- La solution proposée ici pour régulariser les énergies MR-EDF, est fortement guidée par le cas Hamiltonien. En particulier, elle ne s'applique pas a priori à des fonctionnelles non-analytiques dans le plan complexe. Par exemple, la dépendance en puissance non entière de la densité présente dans toutes les fonctionnelles modernes et qui en physique nucléaire permet de reproduire la densité nucléaire à la saturation, ne rentre pas dans le cadre de la solution proposée ici. De même, le terme d'échange de Coulomb Eq. (2.62) qui est généralement calculé à partir d'une approximation de Slater, a une expression en puissance non entière de la densité de proton et donc ne peut être régularisé de cette façon.
- Le fait que le cas Hamiltonien soit automatiquement régularisé pointe du doigt que l'utilisation d'interactions effectives dans différents canaux est très délicate et pose le problème de l'extension de l'énergie SR-EDF au calcul MR-EDF.
- Dans certains travaux, il a été proposé d'utiliser la méthode MR-EDF pour restaurer les bons nombres quantiques en utilisant une dépendance non entière de la densité projetée. C'est-à-dire que les éléments des interactions effectives ne dépendent plus des densités de transition mais de la densité projetée, on a

$$\bar{v} [(\rho^{0\varphi})^\alpha] \longrightarrow \bar{v}[(\rho^{[N,J]})^\alpha], \quad (3.24)$$

où $\rho^{[N,J]}$ est la densité projetée sur les bons nombres quantiques de particules et de moment

angulaire, $\rho^{[N,J]} = P^N P^J \rho$. Cependant, il a également été montré qu'il n'était pas possible d'étendre cette méthode au calcul des états excités notamment dans le cas de la brisure de la symétrie de parité à l'aide de la théorie du mélange de configurations MR-EDF[7].

3.2 Interprétation fonctionnelle de la régularisation MR-EDF dans le cas de la restauration du nombre de particules

La motivation de ce travail est de donner une réponse partielle à la question de savoir où se situe la méthode MR-EDF vis à vis du cadre de la DFT et de ses extensions. En effet, les pathologies présentées précédemment ont montré que l'utilisation conjointe d'une théorie fonctionnelle avec le mélange de configurations doit être appliquée avec précaution. En repartant de l'expression de l'énergie multi-référence pour la restauration du nombre de particules

$$\mathcal{E}^{MR-EDF} = \int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \mathcal{E}[\rho^{0\varphi}, \kappa^{0\varphi}, \kappa^{\varphi 0*}] , \quad (3.25)$$

nous pouvons seulement dire que l'énergie MR-EDF est une fonctionnelle des densités de transition $\rho^{0\varphi}$ et $\kappa^{0\varphi}$. On ne voit donc pas, a priori, le lien avec la DFT. Normalement en DFT, on s'attend à avoir un état de référence à partir duquel il est possible de construire une ou des densités permettant d'exprimer l'énergie ($\Psi \rightarrow \rho^1 \rightarrow \mathcal{E}[\rho^1]$). Le but de cette section est de démontrer que sous certaines conditions l'énergie MR-EDF peut être vue comme une fonctionnelle des densités de l'état projeté. Encore une fois, une fonctionnelle bilinéaire donnée sous la forme de l'Eq. (3.8) est utilisée avec des interactions $\bar{v}^{\rho\rho}$ et $\bar{v}^{\kappa\kappa}$ qui ne dépendent pas de la densité.

3.2.1 Le cas Hamiltonien

Supposons tout d'abord que nous considérons le cas Hamiltonien à deux corps qui est toujours un guide précieux pour comprendre les théories EDF basées sur les interaction effectives. L'énergie projetée sur le bon nombre de particules N à partir d'un état $\Psi(0)$ s'écrit alors

$$E^N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{e^{-i\varphi N}}{c_N} \left[\sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^{0\varphi} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{li}^{0\varphi} \rho_{kj}^{0\varphi} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{ij}^{\varphi 0*} \kappa_{lk}^{0\varphi} \right] , \quad (3.26)$$

où c_N correspond à la norme de l'état projeté

$$c_N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi' e^{-i\varphi' N} \langle \Psi(0) | \Psi(\varphi') \rangle . \quad (3.27)$$

Dans ce cas précis, on sait aussi écrire directement cette énergie en fonction des composantes de l'état projeté $|\Psi^N\rangle = P^N|\Psi\rangle$. Par exemple, dans le cas d'un Hamiltonien à deux corps, on a

$$\begin{aligned} E^N &= \frac{\langle \Psi^N | \hat{H} | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle}, \\ &= \sum_{ij} t_{ij} \frac{\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_j | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \frac{\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

En utilisant les définitions des densités données dans la section 2.1.1.1, on obtient

$$E^N = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^{1[N]} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lkji}^{2[N]}, \quad (3.29)$$

où $\rho_{ji}^{1[N]}$ et $\rho_{lkji}^{2[N]}$ sont respectivement les matrices densités à un et deux corps de l'état Ψ^N qui possède automatiquement le bon nombre de particules N . On trouve finalement le résultat attendu que partant d'un Hamiltonien à deux corps, l'énergie s'écrit comme une fonctionnelle des éléments des matrices densités à un et deux corps de l'état Ψ^N

$$E^N \longrightarrow \mathcal{E}[\rho_{ji}^{1[N]}, \rho_{lkji}^{2[N]}]. \quad (3.30)$$

Cette forme fonctionnelle est toutefois complètement cachée lorsqu'on utilise l'expression de l'énergie (Eq. 3.25). Le lien entre les équations (3.25) et (3.29) devient plus évident en exprimant les densités à un et deux corps en terme de l'angle de jauge (cf. Eqs. 3.33 et 3.34 données ci-après). L'obtention d'une fonctionnelle de la densité à deux corps est relativement peu intéressante. En effet, les théories DFT cherchent en générales à trouver une fonctionnelle d'une quantité simple comme la densité locale à un corps ou éventuellement la matrice densité à un corps $\rho^1(r, r')$. Considérant que tout problème d'interaction à deux corps revient à une fonctionnelle de la matrice densité à deux corps, l'équation (3.30) ne présente en soi que peu d'intérêt. En fait, des simplifications sont possibles en fonction de l'état de référence sur lequel est construite la densité à deux corps. Par exemple, nous verrons par la suite que la densité à deux corps d'un vide de quasi-particules BCS projeté sur l'espace de Fock de N particules, possède des propriétés très particulières et que, notamment, $\rho^{2[N]}$ est une fonctionnelle de $\rho^{1[N]}$. Ainsi, l'énergie E^N de l'équation (3.29) peut effectivement être considérée comme une fonctionnelle de la matrice densité à un corps et retombe bien dans le principe d'une théorie fonctionnelle, ici la DMFT. On aboutit ainsi à la séquence

$$\Psi^N \longrightarrow \rho^{1[N]}, \rho^{2[N]} = f[\rho^{1[N]}] \longrightarrow \mathcal{E}[\rho^{1[N]}]. \quad (3.31)$$

Nous allons maintenant voir si il est possible de montrer le même type de dépendance fonctionnelle partant de la théorie MR-EDF.

3.2.2 Le cas MR-EDF

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, les méthodes SR-EDF et MR-EDF sont fortement inspirées du cas Hamiltonien. Il doit donc être possible d'obtenir un résultat similaire à celui dérivé ci-dessus dans le cas d'un Hamiltonien. Cependant, le raisonnement fait précédemment ne peut être appliqué directement au cas MR-EDF à cause de l'absence d'Hamiltonien sous-jacent et des approximations faites pour dériver l'énergie de simple référence telles qu'une interaction différente dans les canaux particule-trou et particule-particule, des dépendances en densité non entière comme le terme d'échange de Coulomb ou l'antisymétrisation qui est approchée... Notons d'ores et déjà que l'existence de pathologies observées en MR-EDF et absentes dans un cas Hamiltonien font anticiper des différences.

Partant de l'équation (3.1), utilisant la forme bilinéaire définie dans l'Eq. (3.8) et en supposant que les éléments d'interaction ne dépendent pas de la densité, nous obtenons l'expression de l'énergie de multi-références suivante, dans la base canonique de l'état de référence $\Psi(0)$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{MR-EDF} = & \sum_i t_{ii} \int_0^{2\pi} d\varphi \rho_{ii}^{0\varphi} \mathcal{N}(0, \varphi) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} \int_0^{2\pi} d\varphi \rho_{ii}^{0\varphi} \rho_{jj}^{0\varphi} \mathcal{N}(0, \varphi) \\ & + \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\kappa\kappa} \int_0^{2\pi} d\varphi \kappa_{ii}^{\varphi 0*} \kappa_{jj}^{0\varphi} \mathcal{N}(0, \varphi). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Afin de reconnaître éventuellement les matrices densités de l'état projeté dans cette expression, il est utile d'avoir leurs expressions. De façon équivalente à la définition de l'énergie MR-EDF (Eq. 3.1), on peut écrire les densités projetées en fonction des densités normale et anormale de transition. Ainsi, les éléments de la matrice densité à un corps projetée par MR-EDF s'écrivent

$$\rho_{ii}^{1[N]} \equiv \frac{\langle \Psi_N | a_i^\dagger a_i | \Psi_N \rangle}{\langle \Psi_N | \Psi_N \rangle} = \int_0^{2\pi} d\varphi \rho_{ii}^{0\varphi} \mathcal{N}(0, \varphi), \quad (3.33)$$

tandis que ceux de la matrice densité à deux corps

$$\begin{aligned} \rho_{lkji}^{2[N]} & \equiv \frac{\langle \Psi_N | a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l | \Psi_N \rangle}{\langle \Psi_N | \Psi_N \rangle} \\ & = \begin{cases} (\delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk}) \int_0^{2\pi} d\varphi \rho_{ii}^{0\varphi} \rho_{jj}^{0\varphi} \mathcal{N}(0, \varphi) & \text{Canal particule-trou,} \\ + \delta_{j\bar{i}}\delta_{l\bar{k}} \int_0^{2\pi} d\varphi \kappa_{ii}^{\varphi 0*} \kappa_{jj}^{0\varphi} \mathcal{N}(0, \varphi) & \text{Canal particule-particule.} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.34)$$

En utilisant ces expressions, nous pouvons réécrire l'énergie MR-EDF sans régularisation (Eq. 3.26) comme

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{MR-EDF} = & \sum_i t_{ii} \rho_{ii}^{1[N]} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,j \neq \bar{i}} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} \rho_{jijj}^{2[N]} + \frac{1}{4} \sum_{i \neq j, i \neq \bar{j}} \bar{v}_{ijij}^{\kappa\kappa} \rho_{jj\bar{i}\bar{i}}^{2[N]} \\ & + \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{i\bar{i}i\bar{i}}^{\rho\rho} + \bar{v}_{i\bar{i}i\bar{i}}^{\rho\rho}) \int_0^{2\pi} d\varphi \rho_{ii}^{0\varphi} \rho_{i\bar{i}}^{0\varphi} \mathcal{N}(0, \varphi) + \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}i\bar{i}}^{\kappa\kappa} \int_0^{2\pi} d\varphi \kappa_{ii}^{\varphi 0*} \kappa_{i\bar{i}}^{0\varphi} \mathcal{N}(0, \varphi). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Si on met de côté, pour l'instant, la dernière ligne de cette équation, on voit qu'une expression similaire au cas Hamiltonien (Eq. 3.29) est finalement retrouvée, alors l'énergie est fonctionnelle de la densité à deux corps de l'état Ψ^N . Toutefois, il est à noter que la seconde ligne de l'Eq. (3.35) ne peut être réécrite comme une fonctionnelle de $\rho^1 [N]$ ¹ ou de $\rho^2 [N]$. En effet, la fonctionnelle sous-jacente (SR-EDF) qui est définie différemment dans le canal particule-trou ($\bar{v}^{\rho\rho}$) et dans celui de l'appariement ($\bar{v}^{\kappa\kappa} \neq \bar{v}^{\rho\rho}$) ne permet pas ici de reconnaître des éléments des matrices densités projetées. Notons, plusieurs remarques importantes à ce niveau

- La seconde ligne de l'équation ci-dessus correspond justement aux termes où $i = j$ et $\bar{i} = j$ qui sont la source des problèmes (divergences, sauts) observés précédemment.
- Supposons pour un temps que $\bar{v}^{\rho\rho} = \bar{v}^{\kappa\kappa} = \bar{v}$ et que l'antisymétrisation est correctement prise en compte comme dans le cas Hamiltonien, alors on peut utiliser la recombinaison des termes dans les canaux particule-trou et particule-particule discutée ci-avant

$$\rho_{i\bar{i}i}^{2 [N]} = \int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \left((\rho_{ii}^{0\varphi})^2 + \kappa_{i\bar{i}}^{\varphi 0*} \kappa_{\bar{i}i}^{0\varphi} \right), \quad (3.36)$$

de sorte à identifier directement le résultat de l'Eq. (3.30) ce qui nous permet bien de retrouver une fonctionnelle des matrices densités de l'état projeté.

- A l'aide des expressions formelles des densités normale et anormale de transition d'un vide de quasi-particules BCS (Eqs. 3.6), il est possible de montrer que la façon dont les éléments de ce canal se recombinent, est particulière. En effet, dans ce cas on a

$$(\rho_{ii}^{0\varphi})^2 + \kappa_{i\bar{i}}^{\varphi 0*} \kappa_{\bar{i}i}^{0\varphi} \longrightarrow \rho_{ii}^{0\varphi}, \quad (3.37)$$

ce qui entraîne

$$\rho_{i\bar{i}i}^{2 [N]} = \rho_{ii}^{1 [N]}. \quad (3.38)$$

La correction proposée pour régulariser la méthode MR-EDF, est de justement modifier l'expression de ces termes recombinants. Ainsi, nous pouvons maintenant nous poser la question de quels sont les dépendances fonctionnelles lorsqu'on utilise la méthode MR-EDF régularisée ?

Analyse critique des corrections aux théories MR-EDF :

Nous avons vu précédemment que la correction consiste à retirer la contribution divergente des termes situés dans le canal $i = j$ et $\bar{i} = j$ de l'énergie multi-références, régularisant ainsi les courbes d'énergie potentielle.

¹Nous utiliserons lorsque le contexte s'y prête $\rho^{[N]}$, par souci de clarté.

Ci-dessus, nous avons vu que ces termes empêchent également d'interpréter l'énergie MR-EDF comme une fonctionnelle des degrés de liberté à un et deux corps de l'état projeté Ψ^N . Considérons maintenant le cas où la méthode MR-EDF est régularisée comme point de départ de notre discussion. Nous montrons ici, qu'il est alors possible d'exprimer l'énergie associée en fonction des densités de l'état intrinsèque $\Psi(0)$ et de l'état projeté Ψ^N .

La régularisation revient à remplacer les deux derniers termes de l'équation (3.35) par respectivement

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\rho\rho}) \left[\rho_{ii}^{00} \rho_{ii}^{00} + \int_0^{2\pi} d\varphi \, 2\rho_{ii}^{00} \delta\rho_{ii}[\varphi] \mathcal{N}(0, \varphi) \right] \\
 & + \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\rho\rho}) \int_0^{2\pi} d\varphi \, (\delta\rho_{ii}[\varphi])^2 \mathcal{N}(0, \varphi)
 \end{aligned} \right\} & \text{Canal particule-trou ,} \\
 & \left. \begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\kappa\kappa} \kappa_{ii}^{00*} \kappa_{ii}^{00} + \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\kappa\kappa} \int_0^{2\pi} d\varphi \, \delta\kappa_{ii}^*[\varphi] \delta\kappa_{ii}[\varphi] \mathcal{N}(0, \varphi) \\
 & + \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\kappa\kappa} \int_0^{2\pi} d\varphi \, (\kappa_{ii}^{00*} \delta\kappa_{ii}[\varphi] + \kappa_{ii}^{00} \delta\kappa_{ii}^*[\varphi]) \mathcal{N}(0, \varphi)
 \end{aligned} \right\} & \text{Canal particule-particule .}
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

Afin de reconnaître les densités projetées et intrinsèques à partir de ces expressions, il faut introduire une nouvelle quantité ; la différence $\delta\rho_{ii}$ entre les éléments des densités à un corps de l'état projeté Ψ^N et de l'état de référence $\Psi(0)$, ces derniers sont dénotés ρ_{ii}^{00} . Partant de l'équation (3.12) intégrée sur les angles de jauge, on pose

$$\delta\rho_{ii} = \rho_{ii}^{[N]} - \rho_{ii}^{00} = \int_0^{2\pi} d\varphi \, \delta\rho_{ii}[\varphi] \mathcal{N}(0, \varphi) . \tag{3.40}$$

En utilisant cette quantité, on peut réécrire les composantes de l'énergie MR-EDF régularisée. La contribution dans le canal particule-trou de l'énergie projetée et régularisée (Eq. 3.39), devient

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \left(\rho_{ii}^{0\varphi} \rho_{ii}^{0\varphi} - \delta\rho_{ii}[\varphi] \delta\rho_{ii}[\varphi] \right) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \left(\rho_{ii}^{00} \rho_{ii}^{00} + 2 \rho_{ii}^{00} \delta\rho_{ii}[\varphi] \right) \\
 &= (\rho_{ii}^{[N]})^2 - \delta\rho_{ii} \delta\rho_{ii} .
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

De façon similaire, la contribution du canal particule-particule devient

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \left(\kappa_{ii}^{\varphi 0*} \kappa_{ii}^{0\varphi} - \delta\kappa_{ii}^*[\varphi] \delta\kappa_{ii}[\varphi] \right) = \kappa_{ii}^{00*} \kappa_{ii}^{00} + \delta\kappa_{ii}^* \kappa_{ii}^{00} + \kappa_{ii}^{00*} \delta\kappa_{ii} . \tag{3.42}$$

Afin d'exprimer la contribution du canal particule-particule à l'énergie projetée, nous pouvons utiliser la recombinaison des densités Eq. (3.38)

$$\begin{aligned}
 \rho_{ii}^{[N]} &= \rho_{ii}^{00} \rho_{ii}^{00} + 2\rho_{ii}^{00} \delta\rho_{ii} + \int_0^{2\pi} d\varphi \, \delta\rho_{ii}[\varphi] \delta\rho_{ii}[\varphi] \mathcal{N}(0, \varphi) \\
 &\quad + \kappa_{ii}^{00*} \kappa_{ii}^{00} + \delta\kappa_{ii}^* \kappa_{ii}^{00} + \kappa_{ii}^{00*} \delta\kappa_{ii} + \int_0^{2\pi} d\varphi \, \delta\kappa_{ii}^*[\varphi] \delta\kappa_{ii}[\varphi] \mathcal{N}(0, \varphi) ,
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

qui combinée avec l'identité Eq. (3.20) donne

$$\rho_{ii}^{[N]} = \rho_{ii}^{00} \rho_{ii}^{00} + 2\rho_{ii}^{00} \delta\rho_{ii} + \kappa_{ii}^{00*} \kappa_{ii}^{00} + \delta\kappa_{ii}^* \kappa_{ii}^{00} + \kappa_{ii}^{00*} \delta\kappa_{ii} . \quad (3.44)$$

A l'aide de ces résultats, on obtient finalement que

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \mathcal{N}(0, \varphi) \left(\kappa_{ii}^{\varphi 0*} \kappa_{ii}^{0\varphi} - \delta\kappa_{ii}^* [\varphi] \delta\kappa_{ii} [\varphi] \right) = \rho_{ii}^{[N]} (1 - \rho_{ii}^{[N]}) + \delta\rho_{ii} \delta\rho_{ii} , \quad (3.45)$$

qui est multiplié par l'élément d'interaction $\bar{v}_{iiii}^{\kappa\kappa}$ dans l'expression de l'énergie MR-EDF (Eq. 3.39). En utilisant ces résultats, nous voyons que l'énergie après la régularisation proposée dans la référence [5] devient

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{MR-EDF} &= \sum_i t_{ii} \rho_{ii}^{[N]} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\bar{j} \neq \bar{i}} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} \rho_{ji}^{2[N]} + \frac{1}{4} \sum_{i \neq j, i \neq \bar{j}} \bar{v}_{i\bar{j}j\bar{j}}^{\kappa\kappa} \rho_{i\bar{j}j\bar{j}}^{2[N]} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iiii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{iiii}^{\rho\rho}) ((\rho_{ii}^{[N]})^2 - \delta\rho_{ii} \delta\rho_{ii}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{iiii}^{\kappa\kappa} (\rho_{ii}^{[N]} (1 - \rho_{ii}^{[N]}) + \delta\rho_{ii} \delta\rho_{ii}) . \end{aligned} \quad (3.46)$$

(i) Cette expression permet de mettre en évidence l'effet de la régularisation. Après la régularisation de l'énergie MR-EDF, on trouve que l'énergie est une fonctionnelle des densités des états Ψ^N et $\Psi(0)$, et ne donc peut diverger. De plus, comme nous montrons que l'énergie régularisée est une fonctionnelle d'observable, elle est automatiquement invariante par un changement de base.

(ii) Nous venons également de montrer l'équivalence entre la régularisation de la méthode MR-EDF et une expression fonctionnelle de l'énergie. En effet,

$$\mathcal{E}^{MR-EDF} \longleftrightarrow \mathcal{E}[\rho^1[N], \rho^2[N], \rho^{00}] , \quad (3.47)$$

La figure 3.4 montre effectivement que cette équivalence est vérifiée en pratique. Cette figure représente la courbe d'énergie potentielle de l' ^{18}O en fonction du paramètre de déformation quadrupolaire β_2 (Eq. 2.67) en utilisant une interaction effective de Skyrme (SIII) complétée par une interaction d'appariement de contact (Eq. 2.65). L'énergie MR-EDF non régularisée (ligne pointillée bleue) ou régularisée (ligne noire) sont obtenues par la méthode de Fomenko avec 199 points. Comme pour la figure 3.2 précédente, l'Eq. (3.1) de la théorie MR-EDF standard et l'Eq. (3.17) pour celle régularisée sont utilisées. Cette dernière est comparée au résultat obtenu en utilisant directement l'équation (Eq. 3.46) où les densités à un et deux corps sont calculées à partir respectivement des équations (3.33) et (3.34). On voit que l'utilisation de l'expression (Eq. 3.46) est strictement équivalente à l'énergie calculée à partir de la méthode MR-EDF régularisée.

(iii) L'expression fonctionnelle montre que la correction proposée pour régulariser la méthode MR-EDF n'a pas modifiée la limite Hamiltonienne. En effet, on retrouve bien l'énergie calculée à partir de l'état

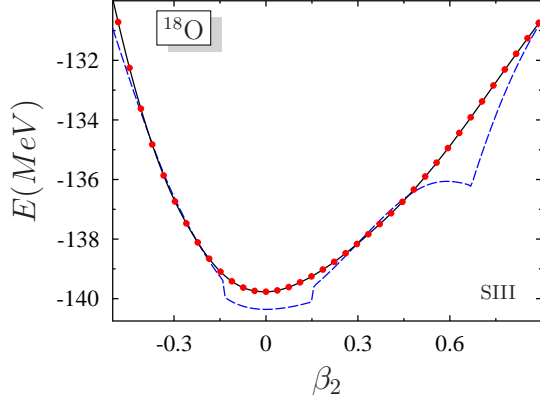


FIG. 3.4: La courbe d'énergie potentielle projetée sur le bon nombre de particules de l' ^{18}O tracée en fonction du paramètre de déformation quadrupolaire β_2 (Eq. 2.67) est obtenue directement par un calcul MR-EDF régularisé (ligne noire) ou non (ligne pointillée bleue) avec la méthode de Fomenko pour 199 points. Les points rouges correspondent à l'énergie obtenue avec l'expression (3.46). Une interaction effective de Skyrme (SIII) complétée par une interaction d'appariement de contact (Eq. 2.65) sont utilisées [87].

projeté sur le bon nombre de particules Ψ^N (Eq. 3.29), lorsque $\bar{v}^{\rho\rho} = \bar{v}^{\kappa\kappa} = \bar{v}$ et que l'antisymétrisation nous assure que $\bar{v}_{iiii} = 0$. Dans cette limite, on voit dans l'expression (3.46) de l'énergie MR-EDF régulière que les deux termes $\delta\rho_{ii}\delta\rho_{ii}$ et $(\rho_{ii}^{[N]})^2$ se recombinent pour donner au final la contribution $\bar{v}_{iiii}\rho_{ii}^{[N]}$ que nous avons identifié dans le cas Hamiltonien (Eq. 3.38).

(iv) Après la correction, on voit que, mis à part la présence de la densité intrinsèque dans $\delta\rho_{ii}$, on a quasiment une fonctionnelle de la densité à un et deux corps de l'état projeté Ψ^N . C'est un résultat très positif car il prouve qu'il est possible de faire correspondre un état projeté au calcul MR-EDF, on a l'enchaînement fonctionnelle suivant

$$\Psi(0) \longrightarrow \Psi^N \longrightarrow \rho^1[N], \rho^2[N], \rho^{00} \longrightarrow \mathcal{E}[\rho^1[N], \rho^2[N], \rho^{00}] = \mathcal{E}^{MR-EDF}, \quad (3.48)$$

ce qui permet de réinterpréter, dans le cas simple et analytique de la projection sur le nombre de particules, la théorie MR-EDF comme une théorie fonctionnelle de la densité projetée et de la densité intrinsèque. Ce n'était pas, a priori, visible avec la formulation MR-EDF (Eq. 3.35) originale qui nous permet uniquement de conclure que \mathcal{E}^{MR-EDF} avant ou après régularisation est une fonctionnelle des densités de transition $\rho_{ii}^{0\varphi}, \kappa_{ii}^{0\varphi}$.

Cette analyse a permis d'avoir un regard nouveau sur l'énergie MR-EDF et sur le rôle de la régularisation. En particulier, on voit que c'est seulement après avoir retiré les termes pathologiques, qu'il est possible d'interpréter l'énergie en tant que fonctionnelle de densités associées à des états auxiliaires à N-corps. Toutefois, il est important de noter qu'une telle analyse ne peut être faite que pour des fonctionnelles régularisables (cf. la discussion de la section 3.1.3). Il est envisageable de généraliser la discussion à des dépendances en densité de type $\hat{\rho}^3, \hat{\rho}^4 \dots$ associées à des interactions effectives à 3, 4... corps. Dans ces cas, il sera possible soit de considérer la théorie MR-EDF régularisée écrite comme une fonctionnelle des densités de transition, soit d'écrire l'énergie comme une fonctionnelle des matrices densités de l'état projeté. Nous allons voir, ci-dessous, que la deuxième approche peut également être appliquée dans le

cas d'une fonctionnelle ne pouvant pas être régularisée, c'est-à-dire dans le cas où les calculs MR-EDF associés ne sont pas définis.

3.3 Vers une théorie fonctionnelle combinant simultanément la brisure et la restauration de symétrie

L'équation (3.46) montre que dans le cas d'une fonctionnelle bilinéaire avec des interactions indépendantes de la densité, l'énergie MR-EDF peut être interprétée comme une fonctionnelle des densités de l'état projeté Ψ^N et de l'état non projeté $\Psi(0)$. Toutefois, dans une approche EDF, on s'attend à ce que les dépendances fonctionnelles de l'énergie soient obtenues à partir des degrés de liberté d'un seul et même état auxiliaire, i.e. soit Ψ^N soit $\Psi(0)$. On voit dans l'expression de \mathcal{E}^{MR-EDF} est à peu près équivalente à une théorie fonctionnelle des degrés de liberté projetés. Ici, nous nous posons la question de savoir si il est possible de formuler directement une théorie EDF tirant avantage de la brisure de symétrie et de sa restauration simultanément. Si l'état projeté sur le bon nombre de particules est utilisé comme état auxiliaire, cela donnerait le schéma suivant

$$P^N \Psi(0) \longrightarrow \Psi^N \longrightarrow \rho^1 [N], \rho^2 [N] \longrightarrow \mathcal{E}^N \left[\rho^1 [N], \rho^2 [N] \right]. \quad (3.49)$$

où le premier enchaînement nous assure de connaître l'état intrinsèque associé à Ψ^N . Ainsi, on voit que la méthode MR-EDF avec régularisation est déjà très proche de ce que nous recherchons. Si on néglige les $\delta\rho_{ii}$ dans l'équation (3.46), on obtient la fonctionnelle suivante

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^N \left[\hat{\rho}^1 [N], \hat{\rho}^2 [N] \right] &= \sum_i t_{ii} \rho_{ii}^{[N]} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,j \neq \bar{i}} \bar{v}_{ijj}^{\rho\rho} \rho_{jji}^{2[N]} + \frac{1}{4} \sum_{i \neq j, i \neq \bar{j}} \bar{v}_{i\bar{j}\bar{j}}^{\kappa\kappa} \rho_{i\bar{j}\bar{j}}^{2[N]} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\rho\rho}) (\rho_{ii}^{[N]})^2 + \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\kappa\kappa} \rho_{ii}^{[N]} (1 - \rho_{ii}^{[N]}). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Il est à noter que l'équation ci-dessus peut effectivement être trouvée en modifiant légèrement la correction proposée dans la référence [5] tout en enlevant les pathologies. Les auteurs de la référence [5] ont effectivement notés que la régularisation de l'énergie (Eq. 3.1) n'est pas unique. Supposons qu'on modifie légèrement la régularisation comme ceci

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{CG}^{\rho\rho} &\longrightarrow \mathcal{E}_{CG}^{\rho\rho} + \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\rho\rho}) (\delta\rho_{ii})^2, \\ \mathcal{E}_{CG}^{\kappa\kappa} &\longrightarrow \mathcal{E}_{CG}^{\kappa\kappa} - \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\kappa\kappa} (\delta\rho_{ii})^2. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Alors, l'énergie MR-EDF après la régularisation aura toujours les propriétés attendues (avant tout chose, elle sera régulière). Elle aura de plus l'avantage de directement donner l'équation (3.50) et de pouvoir être interprétée sans ambiguïté comme une fonctionnelle de $\rho^{[N]}$ et $\rho^2^{[N]}$. La figure 3.5 présente la PES (ligne pointillée verte) obtenue en utilisant la prescription (Eq. 3.50) et la compare à l'énergie MR-EDF corrigée (points rouges) dans les mêmes conditions que la figure 3.4. Elle montre que les différences entre les deux définitions de l'énergie projetée sont négligeables. Ce qui est en accord avec l'amplitude de la correction que nous venons de rajouter avec l'Eq. (3.50) $\delta\rho_{ii} = \rho_{ii}^{[N]} - \rho_{ii}^0$, qui est a priori très modeste. Bien sûr, elle montre aussi qu'un changement de régularisation, à la condition d'utiliser des objets correctement définis (ici des observables), ne remet pas en cause la régularité de l'énergie obtenue.

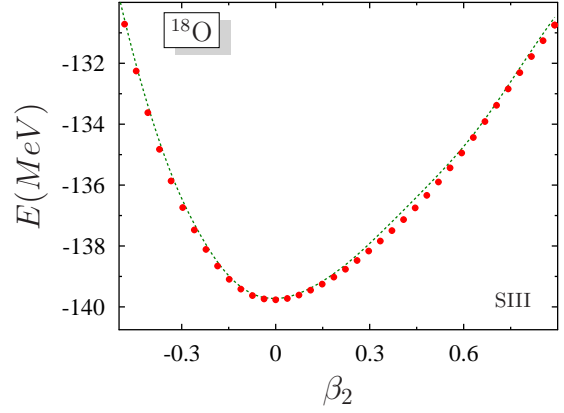


FIG. 3.5: Comparaison entre l'énergie MR-EDF corrigée (points rouges) et l'énergie définie à partir de l'équation (3.50) (ligne pointillée verte). Les paramètres sont similaires à ceux de la figure 3.4.

L'exemple ci-dessus montre qu'il est possible de s'affranchir de la théorie MR-EDF pour obtenir l'énergie de l'état fondamental en l'écrivant directement comme une fonctionnelle de la densité projetée. Au-delà de l'intérêt formel associé à la réinterprétation de la méthode MR-EDF, on voit qu'en partant d'une théorie fonctionnelle basée sur l'expression (3.50) de l'énergie et non de l'Eq. (3.1), on change complètement la philosophie associée à la restauration des symétries dans les théories fonctionnelles. En effet, dans ce cas l'état Ψ^N devient un état de référence (auxiliaire à la Kohn-Sham) grâce auquel sont construites les densités utilisées pour résoudre les dépendances de l'énergie. On rentre donc dans une trame où seul un état est utilisé comme référence, ce qui doit donc être plutôt vu comme l'extension des théories SR-EDF à une autre classe d'états prenant en compte les corrélations au-delà des états de Slater tout en conservant le nombre de particules. L'énergie (Eq. 3.50) prend en compte simultanément la brisure et la restauration de symétrie. En effet, dans cette approche, la brisure de symétrie est cachée dans le fait que l'état est obtenu à partir d'un état de référence sous-jacent de type vide de quasi-particules BCS. Cette approche "deux en un", dans certains cas équivalente à la méthode MR-EDF formulée en deux étapes (brisure puis restauration), change complètement la stratégie utilisée pour tirer avantage des brisures de symétrie dans les théories fonctionnelles. Dans la suite de ce mémoire, cette approche sera appelée "symmetry-conserving EDF" (SC-EDF).

Il est important de noter qu'il existe une grande flexibilité quant à la forme de la fonctionnelle utilisée tout

comme dans les calculs SR-EDF ou DFT dans les systèmes électroniques. L'expression (3.50) est guidée par la méthode MR-EDF, elle-même guidée par le cas Hamiltonien. C'est pourquoi, dans les travaux présentés ci-dessous, nous garderons cette forme comme point de départ. Néanmoins, la discussion ci-dessus sur la flexibilité de la régularisation pose la question de comment doit on et/ou peut on choisir l'expression fonctionnelle de l'énergie dans la partie recombinaire ? Ci-dessous, nous donnons quelques contraintes que doivent vérifier les dépendances fonctionnelles de l'énergie.

3.3.1 Règles de construction d'une théorie SC-EDF guidée par le cas Hamiltonien

Si on se base sur les théories MR-EDF pour construire la fonctionnelle SC-EDF, la seule flexibilité qui existe est contenue dans les deux derniers termes de l'Eq. (3.50). Considérons un cas général où l'énergie est écrite comme

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^N[\hat{\rho}^{1[N]}, \hat{\rho}^{2[N]}] = & \sum_i t_{ii} \rho_{ii}^{[N]} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,j \neq \bar{i}} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} \rho_{jij}^{2[N]} + \frac{1}{4} \sum_{i \neq j, i \neq \bar{j}} \bar{v}_{ijj\bar{j}}^{\kappa\kappa} \rho_{i\bar{j}\bar{j}}^{2[N]} \\ & + \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{iii}^{\rho\kappa}) F_{ii} + \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{iii}^{\kappa\kappa} G_{ii}, \end{aligned} \quad (3.52)$$

Dans le cas particulier de la fonctionnelle bilinéaire régularisée, F_{ii} et G_{ii} s'identifient à

$$\begin{aligned} F_{ii} &= ((\rho_{ii}^{[N]})^2 - (\delta\rho_{ii})^2), \\ G_{ii} &= \rho_{ii}^{[N]}(1 - \rho_{ii}^{[N]}) + (\delta\rho_{ii})^2. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Nous avons vu qu'une modification de la régularisation conduit à des expressions différentes de F_{ii} et G_{ii} . Bien qu'il existe une certaine flexibilité sur leurs expressions, on peut identifier les contraintes suivantes :

- **Règle de somme** : Il semble raisonnable d'imposer que le cas Hamiltonien soit retrouvé. Ainsi, lorsque $\bar{v}^{\rho\rho} = \bar{v}^{\kappa\kappa}$ et $\bar{v}_{iii} = 0$, les deux composantes dans le canal particule-trou et particule-particule doivent se recombinaire selon l'Eq. (3.38), ce qui impose la contrainte

$$F_{ii} + G_{ii} = \rho_{ii}^{[N]}. \quad (3.54)$$

- **Limite SR-EDF sans corrélation particule-trou** : Puisque l'ensemble des états projetés inclut les états de particules indépendantes (états de Slater), il doit être possible à l'aide de la forme fonctionnelle de l'énergie de retrouver cette limite. Cela peut s'écrire sous la forme de la contrainte

$$\mathcal{E}^N[\Psi^N] \xrightarrow[\bar{v}^{\kappa\kappa} \rightarrow 0 \text{ ou } \hat{C}^2[N]=0]{} \mathcal{E}^{SR-EDF}[\Psi_{SD}], \quad (3.55)$$

où Ψ_{SD} est un déterminant de Slater quelconque. Ainsi, l'énergie SC-EDF doit automatiquement s'identifier à l'énergie SR-EDF Eq. (2.53), ce qui conduit à (dans cette limite)

$$F_{ii} = \rho_{ii}\rho_{ii}. \quad (3.56)$$

- **Limite thermodynamique** : Dans la limite d'un nombre de particule infini, on s'attend à retrouver l'expression BCS dans le canal particule-trou et d'appariement. On peut exprimer cette contrainte par

$$\begin{aligned}\lim_{N \rightarrow \infty} F_{ii} &= \rho_{ii} \rho_{ii} , \\ \lim_{N \rightarrow \infty} G_{ii} &= \rho_{ii} (1 - \rho_{ii}) .\end{aligned}\tag{3.57}$$

Ces contraintes limitent de manière significative la forme de F et G . Bien sûr, nous avons aussi que les éléments du canal de recombinaison doivent être bornés et être invariants lors d'un changement de la base des états à un corps $\{\psi_i\}$, ce qui est automatiquement vérifié si F et G sont des fonctionnelles des densités de l'état de référence projeté ou non projeté. La fonctionnelle Eq.(3.50) vérifie automatiquement ces contraintes et sera retenue pour sa simplicité dans la suite de ce travail. Cependant, il semble préférable d'utiliser la dernière définition, nous permettant d'invoquer le cadre de la DFT pour justifier l'approche.

3.3.2 Application de la théorie SC-EDF restaurant le nombre quantique de particule à des fonctionnelles ayant une dépendance non entière de la densité

A ce stade de notre analyse, nous avons clarifié les points suivants

1. Lorsqu'elle est régularisable, la méthode MR-EDF peut être quasiment interprétée comme une théorie fonctionnelle des densités projetées, alors l'état projeté peut être vu comme un état auxiliaire de référence.
2. Une modification légère de la régularisation permet de complètement interpréter l'énergie obtenue comme une fonctionnelle de l'état projeté.
3. La théorie MR-EDF et sa réécriture fonctionnelle sont complètement équivalentes dans le cas de la fonctionnelle SR-EDF schématique bilinéaire (fig. 3.5). Une telle équivalence ne peut être montrée si la fonctionnelle SR-EDF contient un terme en puissance non entière de la densité. En effet, dans ce cas, la régularisation ne peut être appliquée et la définition même des énergies non diagonales $\mathcal{E}[\rho^{0\varphi}, \kappa^{0\varphi}]$ ne peut être faite puisque ces derniers sont multivalués dans le plan complexe[4, 73].

Alors que l'utilisation d'expressions non-analytiques dans le plan complexe ne peut être envisagée dans la méthode MR-EDF, il est possible d'utiliser de telles fonctionnelles dans la formulation SC-EDF. Ceci est illustré dans cette section pour le cas de dépendance de type ρ^α où α peut être un réel. Nous avons vu ci-dessus qu'on pouvait tirer avantage de la brisure et de la restauration de symétrie $\mathcal{U}(1)$ dans

une approche où l'énergie est directement fonctionnelle de l'état projeté. Considérons maintenant le cas où l'énergie SR-EDF contient des interactions effectives dépendantes de la densité, i.e. $\bar{v}^{\rho\rho}[\rho]$ et $\bar{v}^{\kappa\kappa}[\rho]$. Ceci est couramment utilisé dans la plupart des interactions effectives (Gogny ou Skyrme) capables notamment de reproduire les propriétés de saturation de la matière nucléaire telle que l'incompressibilité. Comme nous avons mentionné dans la section précédente, une des contraintes naturelles à imposer lorsqu'on construit la fonctionnelle SC-EDF est de retrouver la bonne limite quand l'état devient un état de particule indépendante. De plus, on désire que la fonctionnelle dépende seulement des degrés de liberté de l'état projeté, une manière simple de respecter ces contraintes est de prendre

$$\begin{aligned}\bar{v}^{\rho\rho}[\rho] &\longrightarrow \bar{v}^{\rho\rho}[\rho^{[N]}] \\ \bar{v}^{\kappa\kappa}[\rho] &\longrightarrow \bar{v}^{\kappa\kappa}[\rho^{[N]}] ,\end{aligned}\tag{3.58}$$

lorsqu'on passe d'un état de Slater à un état projeté. En revenant ainsi à un cadre fonctionnel plus conventionnel, nous pouvons utiliser toute la flexibilité de la DFT pour enrichir la description de l'énergie nucléaire. En effet, l'approche MR-EDF restreint fortement les formes possibles pour l'interaction effective de champ moyen et d'appariement. Alors qu'avec une théorie SC-EDF qui tient compte en même temps de la brisure et de la restauration de la symétrie de jauge, nous pouvons sans soucis justifier l'utilisation de dépendances non entières dans les interactions effectives, où l'état projeté est alors considéré comme l'état de référence pour entre autre résoudre les dépendances en densité. C'est donc, par analogie avec la définition des énergies SR-EDF couramment utilisées en physique nucléaire, que nous définissons une théorie SC-EDF équivalente pour l'état projeté sur le bon nombre de particule avec les dépendances de contact suivantes

$$\begin{aligned}v^{\rho\rho}[\rho^{[N]}(r)] &\longrightarrow t_3(1 + x_3P_{\sigma_1\sigma_2}) (\rho^{[N]}(r))^\alpha , \\ \bar{v}^{\kappa\kappa}[\rho^{[N]}(r)] &\longrightarrow g \left[1 - \left(\frac{\rho^1(r)}{\rho_0} \right)^\alpha \right] .\end{aligned}\tag{3.59}$$

La figure 3.6 illustre l'énergie (cercles pleins rouges) obtenue à l'aide d'une théorie SR-EDF définie à partir d'un état dont la symétrie de jauge a été brisée puis restaurée, et une interaction effective dépendante de la densité (SLy4). Sur cette figure, le résultat SC-EDF, obtenu en appliquant la méthode SC-EDF et en utilisant la prescription ci-dessus (Eq. 3.59), est comparé aux résultats fonctionnels obtenus avec la théorie MR-EDF standard non corrigée (ligne pointillée bleue). Dans ce dernier cas, l'énergie elle même est mal définie et la régularisation n'est pas possible à cause de la dépendance non entière de la densité. Le potentiel effective SLy4 possède une dépendance en densité en $\bar{v}^{\rho\rho}[(\rho^{[N]}(r))^\alpha]$, avec $\alpha = 0.14$. On retrouve sur la courbe MR-EDF l'existence des divergences qui ont été à l'origine des discussions récentes sur les fondations de la méthode MR-EDF.

L'existence de régularisation seulement pour des dépendances entières de la densité restreint considérablement la forme des fonctionnelles utilisables en MR-EDF. La méthode proposée dans ce mémoire ne

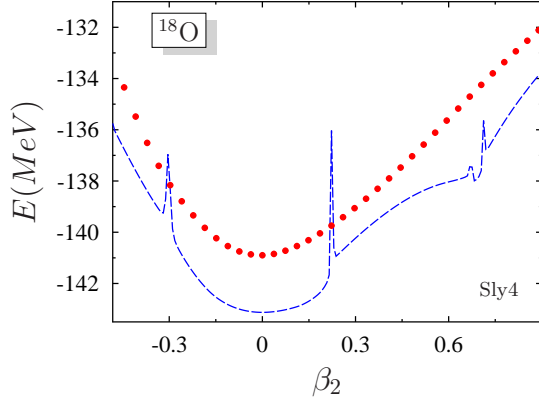


FIG. 3.6: La courbe d'énergie potentielle projetée sur le bon nombre de particule tracée en fonction de β_2 est comparée entre un calcul MR-EDF non régularisé (ligne pointillée bleue) et la théorie SC-EDF (cercles pleins rouges) qui utilise l'Eq. (3.46) et la prescription Eq. (3.59). Une interaction effective de Skyrme (SLy4) contenant des termes en puissance non entière de la densité est utilisée dans le canal particule-trou. Les autres paramètres sont identiques aux figures 3.4 et 3.5. En particulier une discrétisation de Fomenko avec 199 points et une interaction d'appariement de contact sans dépendance en densité sont retenus.

peut pas par construction, présenter de divergences. On le voit sur la figure 3.6 où la courbe SC-EDF est parfaitement régulière, et indépendante du nombre de points utilisés dans le calcul des densités projetées. Un des intérêts de l'approche SC-EDF, est d'être une extension naturelle de la méthode SR-EDF qui permet de traiter la restauration du nombre de particule dans le cadre des corrélations d'appariement. Elle permet de plus de pouvoir garder les interactions généralement utilisées en SR-EDF, voir de prendre des fonctionnelles avec des dépendances encore plus variées. La méthode SC-EDF est très intéressante en pratique. Effectivement, les restrictions imposées par la régularisation nécessaire à l'utilisation d'une théorie MR-EDF dont l'énergie est exprimée à partir d'intégration sur les angles jauge, sont très contraignantes. En particulier, la contrainte d'avoir des fonctionnelles SR-EDF uniquement en puissance entière de la densité limite considérablement le type de fonctionnelles. Les récents travaux[4, 5, 73, 74] pour définir les interactions utilisables en MR-EDF montrent qu'il est nécessaire de rester très proche du cas Hamiltonien. Cependant, l'analyse que nous avons faite dans le cas particulier de la projection sur l'espace de Fock de N particules montre que l'énergie corrigée correspond à une théorie fonctionnelle construite à partir d'un seul état, l'état projeté, et donc nous pouvons nous permettre de réinterpréter cette approche comme un niveau de simple référence où les contraintes présentes en MR-EDF sur le potentiel effectif sont relâchées.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, un bref historique sur la mise en évidence des pathologies observées dans les calculs MR-EDF combinant un mélange de configurations et une théorie fonctionnelle a été présenté. La

solution minimale a ces problèmes proposée dans les références[5, 73, 74], a été discutée et analysée dans le cas de la restauration du nombre quantique de particule. Une analyse fine de la méthode MR-EDF et de sa régularisation a permis une interprétation en terme de fonctionnelle des densités de l'état projeté. Cela montre que la méthode MR-EDF régularisée est à peu de chose près une théorie SR-EDF où la symétrie a été brisée puis restaurée (SC-EDF). Dans ce cas, l'état de référence correspond à l'état projeté sur le bon nombre de particule. Comme au niveau SR-EDF, nous avons montré que l'énergie est en fait une forme fonctionnelle des densités de cet état, mais cette fois ci des densités à un et deux corps. Dans le cas d'une fonctionnelle bilinéaire de $\hat{\rho}^1$ et κ sans dépendance en puissance non entière de la densité au niveau SR-EDF, nous avons montré qu'une petite modification dans la régularisation permet d'avoir une théorie fonctionnelle de l'état projeté. En pratique cette modification change peu les courbes d'énergie potentielle. Un ensemble de contraintes permettant de retrouver certaines limites physiques comme l'approximation de particule indépendante ou la théorie Hamiltonienne ont été proposées. Elles permettent de définir une formulation fonctionnelle de la projection. Dans cette approche appelée "symmetry conserving EDF", il est possible de réutiliser des dépendances en densité telles que les puissances non-entières. Cela permet de retrouver la flexibilité SR-EDF, a priori perdu lors du passage à une théorie régularisable MR-EDF.

Dans la formulation que nous avons proposé (Eq. 3.50), la difficulté est de traiter la densité projetée à deux corps qui intervient explicitement dans l'expression de l'énergie. Toutefois, on peut montrer que dans le cas d'un état $\Psi(0)$ s'identifiant à un vide de quasi-particules de type BCS, la densité à deux corps de l'état projeté est une fonctionnelle de la densité à un corps (cf. chapitre 5). Ainsi, à l'instar de la théorie BCS au niveau SR-EDF, on retrouve le cadre de la DMFT où l'énergie est une fonctionnelle de la matrice densité à un corps. Dans ce chapitre, la théorie SC-EDF a été utilisée pour effectuer une projection après la variation. En effet, les figures 3.5 et 3.6 présentées ci-dessus illustrent l'énergie directement obtenue en utilisant Eq. (3.50) à partir d'un état $\Psi(0)$ et calculé en minimisant l'énergie SR-EDF associée. Il est également possible de formuler la théorie SC-EDF (ou MR-EDF) de sorte à faire des calculs variationnels après la projection (VAP). Dans ce cas, c'est directement l'équation (3.50) qui doit être minimisée. La méthode VAP est toutefois plus complexe à mettre en pratique. Très peu d'applications ont pu être faites dans le cas d'une interaction effective réaliste et jamais en corrigeant des pathologies MR-EDF. Dans le chapitre suivant, la VAP effectuée pour le cas PNR est appliquée pour la première fois en évitant les problèmes de régularisation grâce à la formulation SC-EDF présentée ici. Enfin, il est important de noter que dans ce chapitre et plus généralement dans ce travail de thèse, nous nous sommes concentrés au cas particulier de la projection sur l'espace de Fock de N particules qui est de loin la projection la plus simple à réaliser. La méthode VAP permet de résoudre le manque de corrélation d'appariement lorsque l'interaction d'appariement est faible (cf. figure 2.3). En effet, la brisure puis la restauration d'une symétrie (dans un cadre fonctionnel) permet d'enrichir la forme fonctionnelle de l'énergie.

Il serait très intéressant d'étendre ce travail à d'autres symétries, par exemple les symétries spatiales. En particulier de récents travaux montrent que ces dernières réduisent considérablement les possibilités fonctionnelles au niveau SR-EDF. Une deuxième remarque importante, est que la méthode MR-EDF permet aussi d'obtenir les états excités. Ce n'est pas le cas de la méthode SC-EDF telle qu'elle est formulée ici, qui permet de calculer l'énergie de l'état fondamental uniquement et qui peut éventuellement être étendue pour avoir l'état le plus bas en énergie pour un moment cinétique total J donné.

Principe variationnel sur un état de Bardeen-Cooper-Schrieffer projeté

Résumé :

L'utilisation de vides de quasi-particules qui brisent la conservation du nombre de particules, ne permet pas de décrire correctement l'énergie de corrélation dans tous les régimes observés en physique nucléaire. En particulier, lorsque la force de l'interaction d'appariement est faible ces états ne prédisent peu ou aucune corrélation. La méthode fonctionnelle SC-EDF obtenue à partir de la brisure puis de la restauration d'un vide de quasi-particules permet de palier à ces problèmes, si elle est utilisée dans une approche de variation après la projection (VAP). Nous présentons ici, la forme explicite de l'énergie et des densités utilisées dans cette approche, ce qui nous permet dans un second temps de dériver les équations du minimum, puis de donner une méthode numérique efficace pour les résoudre. Enfin, des applications dans le cas d'une interaction effective réaliste de type Skyrme dépendant de la densité sont proposées pour la chaîne isotopique des Kryptons.

Sommaire

4.1 Généralités	73
4.1.1 Motivation	73
4.1.2 Point de départ de la théorie VAP appliquée au formalisme SC-EDF	76
4.2 Application du principe variationnel	77
4.2.1 Propriétés des états projetés	78
Définitions	79
Relations de récurrence	80

	Expressions des éléments des matrices densités	80
	Résolution pratique	81
	Perspectives et remarques sur la spectroscopie des états PBCS	83
4.2.2	Equations d'Euler-Lagrange du problème	84
	Condition du minimum pour les états à un corps	85
	Condition du minimum pour les probabilités d'occupation de l'état BCS de référence	86
4.2.3	Résolution numérique	87
4.3	Résultats	92
4.4	Conclusion	95

4.1 Généralités

Dans le chapitre précédent, nous avons proposé une approche fonctionnelle appelée SC-EDF, qui permet de prendre en compte la brisure et la restauration de symétrie simultanément. Toutefois, l'expression de l'énergie SC-EDF a été utilisée que dans le cadre de la PAV, c'est-à-dire qu'elle a été appliquée à un état de référence de type BCS optimisé par un principe variationnel et l'état a été projeté à posteriori. La méthode de la variation après projection qui correspond à minimiser directement le principe variationnel associé à la fonctionnelle SC-EDF permet d'optimiser les degrés de liberté de l'état de qp projeté sur l'espace de Fock de N particules et offre des perspectives plus intéressantes (cf. figure 4.1). Ci-dessous, les motivations de l'utilisation d'états projetés dans le principe variationnel, i.e. la méthode VAP, sont expliquées.

4.1.1 Motivation

La méthode PAV, appliquée dans le chapitre précédent ne vérifie pas un principe variationnel et donc l'énergie associée ne correspond pas à un minimum sur dans l'espace des états projetés. Elle est toutefois très souvent appliquée dans les théories MR-EDF et s'avère, dans ce contexte, déjà numériquement compliquée à mettre en œuvre. La PAV est illustrée dans le chapitre précédent, par exemple, avec la figure 3.6. Comme nous l'avons discuté dans le chapitre 2, le principe de la PAV consiste à obtenir un état de référence qui respecte le principe variationnel dans l'espace des états de quasi-particules. Ensuite, l'énergie projetée est calculée à partir de l'équation (3.1) en corrigeant à l'aide de la régularisation (cf. section 3.1.2). Une application directe de cette approche ne corrige toutefois pas les défauts de l'état de quasi-particules utilisé en SR-EDF. En particulier, dans le cas des noyaux doublement/simplement magiques, elle prédit des corrélations d'appariement nulles. C'est pourquoi, il faut rappeler que le plus souvent, la méthode proposée par Lipkin et Nogami[88, 89], dénotée dans la suite par LN, est utilisée au niveau SR-EDF. Dans LN, l'énergie projetée[90] est minimisée par rapport au degré de liberté supplémentaire $\langle(\Delta N)^2\rangle = \delta N_2$ (et éventuellement avec ceux d'ordre supérieur $\langle(\Delta N)^k\rangle = \delta N_k$) pour obtenir un ensemble d'états de qp améliorés (cf. la méthode RVAP, section 5.2.4). Ainsi, le minimum de la PAV sur cet ensemble est recherché en fonction des δN_2 , par exemple dans les références [90–94]. L'état de quasi-particules sous-jacent qui est finalement obtenu, se rapproche du minimum VAP à partir d'une optimisation de ses degrés de libertés associés à la symétrie de jauge, ici les fluctuations du nombre de particules. Cependant, l'utilisation de ces méthodes qui sont combinées avec une projection après la variation, ne permet pas de décrire de façon raisonnable l'ensemble de la charte des noyaux. En effet, comme nous avons remarqué sur la figure 2.3, l'énergie de liaison des noyaux doublements magiques est généralement surestimée comparativement à ses voisins. Il est possible d'améliorer le traitement des corrélations d'appariement qui lorsqu'on utilise des vides de quasi-particules, sont nulles ou trop faibles

quand la force de l'interaction d'appariement devient comparable ou inférieure à l'espacement entre les niveaux à un corps près de l'énergie de Fermi. En pratique, on peut avoir une idée de son intensité à l'aide de la quantité $\frac{g}{\Delta\varepsilon}$, où g est l'intensité de l'interaction d'appariement et intervient dans l'interaction du canal d'appariement par exemple dans l'Eq. (2.65) et où $\Delta\varepsilon$ correspond à l'espacement moyen des énergies à un corps du noyau (proches du niveau de Fermi). Dans le cas des noyaux doublements magiques, on a $\Delta\varepsilon \gg g$ ce qui explique le manque de corrélation d'appariement au niveau SR-EDF. La projection PAV ne peut pas, de part son caractère non-variationnel, rajouter des corrélations d'appariement si l'état de référence n'en incorpore pas au départ, puisque dans ce cas, la solution du problème est un déterminant de Slater Ψ_{SD} qui a un bon nombre de particules, c'est-à-dire

$$P^N |\Psi_{SD}\rangle = |\Psi_{SD}\rangle. \quad (4.1)$$

Afin d'illustrer l'absence de corrélations d'appariement à faible couplage dans des théories basées sur des vides de quasi-particules, on a tracé, sur la figure 4.1, l'énergie de corrélation définie par

$$\mathbf{E} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - E_{HF} = E - E_{HF}, \quad (4.2)$$

où Ψ est un état d'essai et E_{HF} l'énergie obtenue avec l'approximation de particules indépendantes, en fonction de la constante de pairing g dans le cas du Hamiltonien schématique de pairing appelé aussi Hamiltonien de Richardson[13, 95]. Cet Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i + g \sum_{ij} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_i a_{\bar{j}}, \quad (4.3)$$

où les énergies à un corps ε_i sont fixées et respectent $\varepsilon_i = \varepsilon_{\bar{i}}$ et un espacement équidistant noté $\Delta\varepsilon$, et où g correspond à la constante de couplage (ou d'appariement). Les détails techniques associés aux solutions exactes ou approchées de ce modèle seront détaillées dans le chapitre 6.

Les énergies obtenues en PAV (triangles violets) et en VAP (cercles bleus) construites sur un état de référence de type vide de quasi-particules (ici un vide BCS) ainsi que l'énergie BCS de départ (ligne pointillée verte) sont comparées à la solution exacte[13, 90, 95, 96] (ligne rouge). Dans l'encadré, la quantité $n_i(1 - n_i)$, prédite par les différentes théories, est tracée pour la valeur de la constante d'appariement $g/\Delta\varepsilon = 0.82$ en fonction des énergies à un corps normalisées $\varepsilon_i/\Delta\varepsilon$. Dans le cas BCS, cette quantité est égale à la probabilité d'occupation de paires $\kappa_{\bar{i}i}^* \kappa_{i\bar{i}}$. Cette figure illustre l'absence de corrélations dans les théories BCS ou PAV à faible couplage $\frac{g}{\Delta\varepsilon} \ll 1$. En effet, dans les deux cas, les corrélations se construisent lorsque la force d'appariement ($g/\Delta\varepsilon$) atteint un seuil, sous ce seuil la solution BCS s'identifie avec la solution Hartree-Fock. On voit toutefois que dans le cas exact, la solution Hartree-Fock correspond uniquement à la limite $g = 0$. La projection PAV améliore grandement la description de l'énergie de corrélation par rapport au cas BCS, notamment à fort couplage. Cependant, on remarque dans l'encadré de la figure que les probabilités d'occupation prédites par la méthode PAV reproduisent

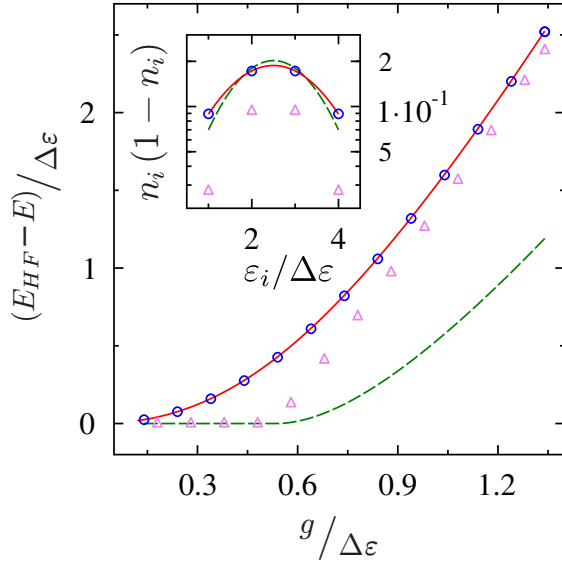


FIG. 4.1: L'énergie de corrélation $E_{HF} - E$ normalisée par l'espacement moyen des énergies à un corps $\Delta\epsilon$ obtenue dans le cas de l'Hamiltonien schématisé de pairing est tracée en fonction de la constante de pairing $g/\Delta\epsilon$ pour 4 particules dans les différentes théories BCS, PAV, VAP et exacte. Les méthodes BCS (ligne pointillée long verte), VAP (cercles bleus) et PAV (triangles violets) sont comparées à la solution exacte de Richardson (ligne continue rouge). Dans l'encadré, la quantité $n_i(1 - n_i)$, prédite par les différentes théories, est tracée pour la constante de pairing $g/\Delta\epsilon = 0.82$ en fonction des énergies à un corps ϵ_i .

moins bien la solution exacte que celles obtenues avec l'état de référence BCS. C'est un désavantage, puisque cela signifie que la densité à un corps est a priori moins bien prédite après projection (PAV) que avant. Notons que l'utilisation de LN permet de corriger en partie ce problème.

Sur cette figure, on remarque que la VAP reproduit très bien l'énergie exacte et les nombres d'occupation quel que soit le couplage. De plus, les corrélations sont construites dès que l'interaction d'appariement g est non nulle. En fait, on peut montrer avec les mains qu'on s'attend à un tel résultat. L'idée est d'obtenir un état ne possédant pas le bon nombre quantique de nucléons mais dont la distribution sur les valeurs propres de \hat{N} soit très piquée autour de la valeur moyenne correspondant à un état avec les bonnes symétries. En considérant nos remarques précédentes, utiliser une théorie VAP revient à ajouter à l'énergie d'un état Ψ dont la symétrie de jauge $\mathcal{U}(1)$ n'est pas imposée, les contraintes suivantes

$$E^N \longrightarrow E - \sum_{k>0} \gamma_k \langle (\Delta N)^k \rangle, \quad (4.4)$$

où γ_k est un paramètre de Lagrange et toutes les contraintes $\langle (\Delta N)^k \rangle = 0$ imposent que le minimum correspond à une valeur propre de \hat{N} alors E^N est l'énergie dans l'espace de Fock de N particules. Dans le cas général, on peut écrire que $\langle (\Delta N)^2 \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}^1 - (\hat{\rho}^1)^2) - \text{Tr}\hat{\rho}^2$. Au second ordre en fixant γ_2 (cf. section 5.2.4), le paramètre de Lagrange va renormaliser l'interaction du canal d'appariement en la rendant "plus forte". Par exemple, pour les vides de qp l'expression suivante $(\bar{v}_{ijkl} - \gamma_2) \kappa_{ij}^* \kappa_{lk}$ contribue à l'énergie d'appariement. Cela revient, dans le cas d'un état BCS, à faire translater le seuil des corrélations d'appariement vers l'origine et explique que ce problème de seuil soit associé à la brisure de la symétrie de jauge.

L'application des différentes approches à l'Hamiltonien schématique d'appariement illustre parfaitement l'avantage d'utiliser la VAP plutôt que la PAV. Non seulement, on s'attend à améliorer la description des corrélations d'appariement notamment à couplage faible ou intermédiaire, mais aussi l'ensemble des observables à un corps. Dans le cadre de ce travail, nous avons appliqué la VAP aux noyaux en utilisant l'approche SC-EDF. Un état de type BCS est utilisé comme point de départ. Sa projection sur le bon nombre quantique de particules, appelée PBCS ci-dessous (pour "projected BCS"), est utilisée comme l'état de référence dans la théorie SC-EDF.

Il existe de nombreux travaux[97] sur le sujet, en particulier pour l'application de la VAP dans le cadre de la théorie MR-EDF[69, 70, 98]. Cette méthode est a priori numériquement compliquée à mettre en œuvre et dans le cas de la théorie MR-EDF, il n'était jusqu'à présent pas possible de l'appliquer à cause des problèmes de divergence rencontrés lors de la combinaison de la théorie SR-EDF fonctionnelle et du mélange de configurations. Nous proposons ici d'appliquer la variation après la projection, dans le cadre d'une fonctionnelle SC-EDF qui inclut automatiquement la régularisation. De plus, nous montrons dans ce chapitre des applications avec des fonctionnelles contenant des dépendances en puissance non entière de la densité qui ne peuvent pas être régularisées dans le cadre de la théorie MR-EDF. Nous détaillons de façon exhaustive les étapes pratiques de l'application de la méthode SC-EDF pour des fonctionnelles réalistes. Les différentes équations et méthodes numériques sont présentées. Une méthode alternative à l'intégration sur les angles de jauge est proposée, elle est appelée ci-dessous méthode de récurrence et permet de calculer de manière très précise les composantes des densités de l'état projeté. Enfin, des résultats de la VAP appliqués aux noyaux sont discutées.

4.1.2 Point de départ de la théorie VAP appliquée au formalisme SC-EDF

Nous considérons comme point de départ l'expression de l'énergie SC-EDF obtenue dans le chapitre précédent (cf. section 3.3). L'énergie fonctionnelle a donc l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\hat{\rho}^{[N]}, \hat{\rho}^{2[N]}] &= \sum_i t_{ii} \rho_{ii}^{[N]} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,j \neq \bar{i}} \bar{v}_{ijj}^{\rho\rho} \rho_{jji}^{2[N]} + \frac{1}{4} \sum_{i \neq j, i \neq \bar{j}} \bar{v}_{ijj}^{\kappa\kappa} \rho_{jj\bar{i}}^{2[N]} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\rho\rho}) (\rho_{ii}^{[N]})^2 + \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}}^{\kappa\kappa} \rho_{ii}^{[N]} (1 - \rho_{ii}^{[N]}). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Dans la théorie SC-EDF, les densités sont construites à partir d'un état BCS projeté¹, c'est-à-dire que l'état de référence Ψ^N correspond à la projection d'un état BCS Ψ sur l'espace de Fock de N particules. Ainsi, on a

$$|\Psi^N\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\varphi(\hat{N}-N)} \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |-\rangle. \quad (4.6)$$

¹Cette théorie peut être formulée à partir d'un état HFB toutefois cela complique le formalisme.

Les degrés de liberté de l'état PBCS sont entièrement contenus dans la définition (4.6) et par commodité nous noterons $x_i = \frac{v_i}{u_i}$.

La variation doit se faire par rapport à ces degrés de liberté de l'état projeté, c'est-à-dire par rapport (i) aux $\{x_i\}$ et (ii) aux états à un corps $\{\psi_i\}$ associés aux opérateurs de création $\{a_i^\dagger\}$, ce qui permet d'optimiser l'organisation des nucléons sur les états à un corps et la base d'états à un corps sur laquelle l'état PBCS est construit. Le point de départ est ici similaire à l'application du principe variationnel dans les références [99–101]. En pratique, la minimisation de l'énergie doit être faite en imposant des contraintes sur l'orthonormalité des fonctions d'onde associées aux paramètres de Lagrange ε_{ij} . On doit alors résoudre l'équation d'Euler-Lagrange suivante,

$$\delta \left(\mathcal{E}[\hat{\rho}^{[N]}, \hat{\rho}^{2[N]}] + \sum_{ij} \varepsilon_{ij} \int d\vec{r} \psi_i^*(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) \right) = 0, \quad (4.7)$$

où les variations sont appliquées soit sur les x_i , soit sur les ψ_i^* (ou ψ_i). Dans le principe, cette technique est similaire à celle proposée [78–81] pour appliquer la VAP en partant des méthodes MR-EDF. En effet, dans ce cas, ce sont également les quantités qui définissent l'état de quasi-particules qui sont variées tels que les x_i^2 .

Avant de donner les détails de la dérivation et de la résolution numérique de cette équation, il est nécessaire d'exprimer les densités à un et deux corps, $\hat{\rho}^{[N]}$ et $\hat{\rho}^{2[N]}$, en fonction des degrés de liberté de l'état PBCS. C'est possible puisque,

$$x_1 \cdots x_i \cdots x_{i_{\Omega > N}}, \psi_i \cdots \psi_{i_{\Omega}} \longrightarrow \Psi^N \longrightarrow \hat{\rho}^{[N]}, \hat{\rho}^{2[N]} \longrightarrow \hat{\rho}^{[N]}, \quad (4.8)$$

où Ω correspond au nombre d'états $\{\psi_i\}$. D'habitude, l'équation du minimum est obtenue en dérivant les énergies entrantes dans les calculs MR-EDF (Eq 3.1) par rapport aux degrés de liberté de l'état projeté. Dans ce cas, l'application de la VAP au cas MR-EDF aura les mêmes problèmes de divergence. Ainsi, la régularisation devra être prise en compte dans la recherche du minimum, cela n'a jamais été fait jusqu'à présent ou VAP. Comme nous avons discuté dans le chapitre précédent, l'utilisation de l'Eq. (3.50) où l'énergie est directement exprimée comme une fonctionnelle des densités de l'état projeté, a l'avantage (i) d'inclure automatiquement la régularisation et d'être équivalente aux calculs MR-EDF dans le cas où une telle régularisation existe, et (ii) de pouvoir être appliquée à des fonctionnelles plus variées et notamment celles utilisées généralement au niveau du champ moyen (SR-EDF) avec ou sans prendre en compte les corrélations d'appariement. Dans la suite de ce chapitre, la forme explicite des équations du minimum ainsi que les détails numériques sont donnés.

4.2 Application du principe variationnel

Afin d'appliquer la variation à l'état BCS projeté, il faut rendre explicite l'expression des matrices densités à un et deux corps projetées ce qui nous permettra de dériver les équations d'Euler-Lagrange

associées et d'optimiser la méthode numérique résolvant les équations non-linéaires du minimum. Dans la section 3.1.1, les matrices densités à un et deux corps ont été données en terme d'intégrales sur les angles de jauge. Ces formes sont parfois utilisées pour faire les variations[69, 70]. Ici nous utilisons une méthode alternative dérivée à partir de relations de récurrence. Nous allons, comme étape préliminaire, expliciter quelque-unes des propriétés originales des états PBCS et réécrire les recouvrements du Hamiltonien sous une forme simplifiée permettant des calculs formels et une bonne efficacité numérique.

4.2.1 Propriétés des états projetés

Afin de rendre explicite les variations de l'énergie, nous allons présenter quelques propriétés des états projetés. Dans un premier temps, nous pouvons vérifier les remarques faites sur la richesse des états cohérents introduits dans les chapitres précédents. Par exemple, nous pouvons développer formellement l'équation (2.19) en utilisant les propriétés particulières de ces états. En partant de l'équation (4.6), on obtient que

$$\begin{aligned}
 P^N |\Psi\rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i\varphi N} \prod_{i>0} (1 + x_i e^{i\varphi} a_i^\dagger a_i^\dagger) |-\rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i\varphi N} \sum_n \frac{1}{n!} e^{2i\varphi n} \left(\sum_i x_i a_i^\dagger a_i^\dagger \right)^n |-\rangle \\
 |\Psi^N\rangle &= \frac{1}{N!} \left(\sum_i x_i a_i^\dagger a_i^\dagger \right)^N |-\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

où nous nous sommes servi du fait que $\int d\varphi e^{-i\varphi(N-2n)} = \delta(N-2n)$, N correspond alors au nombre de paires et l'état ci-dessus ne peut décrire que des états de nombre de particules pair. Ainsi, à partir d'un état sous-jacent de type vide de qp qui brise la symétrie de jauge que l'on restaure a posteriori, on obtient un état mélangé dont la distribution dans l'espace de Fock est un cas particulier de l'Eq. (2.1). C'est une raison pourquoi les méthodes MR-EDF et SC-EDF sont utilisées car elles combinent la simplicité d'utiliser un état produit (tel que un vide de qp) sous-jacent avec l'avantage de rajouter des corrélations associées à la restauration de la symétrie.

L'état BCS correspond à un état cohérent de paires de nucléons de spin opposé, on voit dans l'équation ci-dessous qu'il est possible de projeter uniquement sur des états de nombre de particules pair, noté ici $2N$. Comme dans le cas de l'état cohérent, on remarque que l'état projeté qui est associé à l'ansatz BCS se comporte comme un condensat de créateur de paire Γ^\dagger qui consiste en la superposition

$$\Gamma^\dagger = \sum_{i>0} x_i a_i^\dagger a_i^\dagger. \tag{4.10}$$

Utilisant la propriété des opérateurs de création $(a_i^\dagger)^2 = 0$ et en développant $(\Gamma^\dagger)^N$, on peut exprimer l'état projeté comme une somme de produit de a_i^\dagger tous différents deux à deux

$$|\Psi^N\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N}^{\neq} x_{i_1} \cdots x_{i_N} a_{i_1}^\dagger a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_N}^\dagger a_{i_N}^\dagger |-\rangle, \quad (4.11)$$

où les indices i_1, \dots, i_N sont deux à deux différents, ce qui est identifié par la notation \neq dans la somme. La distribution des états PBCS dans l'espace de Fock est analogue à celle des états cohérents (cf. chapitre 2) où les $x_i, x_{\bar{i}}$ ont été regroupés deux à deux, ce que nous remarquons déjà lors de la discussion sur les propriétés des états cohérents et cohérents de pair. Dans la suite de cette section, quelques méthodes qui permettent de rendre explicite les recouvrements nécessaires pour exprimer les densités de l'état projeté, sont présentées.

Définitions :

Partant de l'équation (4.11), la norme de l'état PBCS est exprimée par

$$I^N = \langle \Psi^N | \Psi^N \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{i_1, \dots, i_N}^{\neq} x_{i_1}^2 \cdots x_{i_N}^2. \quad (4.12)$$

Nous remarquons que le recouvrement I^N est un polynôme particulier des $\{x_{i_1}^2\}$. Il peut effectivement s'identifier aux polynômes élémentaires symétriques[102]. En général, les propriétés que nous allons présenter comme celle ci-dessus, s'appliquent à tous les recouvrements que nous utiliserons par la suite. Effectivement, nous allons exprimer l'énergie et les densités de l'état projeté Ψ^N à partir des normes des états construits de la façon suivante

$$\begin{aligned} |\Psi^N(i)\rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_N \neq i}^{\neq} x_{i_1} \cdots x_{i_N} a_{i_1}^\dagger a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_N}^\dagger a_{i_N}^\dagger |-\rangle, \\ |\Psi^{N-1}(i)\rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_{N-1} \neq i}^{\neq} x_{i_1} \cdots x_{i_{N-1}} a_{i_1}^\dagger a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_{N-1}}^\dagger a_{i_{N-1}}^\dagger |-\rangle, \\ |\Psi^N(i, j)\rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_N \neq (i, j)}^{\neq} x_{i_1} \cdots x_{i_N} a_{i_1}^\dagger a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_N}^\dagger a_{i_N}^\dagger |-\rangle, \\ |\Psi^{N-1}(i, j)\rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_{N-1} \neq (i, j)}^{\neq} x_{i_1} \cdots x_{i_{N-1}} a_{i_1}^\dagger a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_{N-1}}^\dagger a_{i_{N-1}}^\dagger |-\rangle, \\ &\dots \end{aligned} \quad (4.13)$$

qui appartiennent tous à la même classe d'états que PBCS. En effet, ils correspondent à l'expression (Eq. 4.11) où on a soit retiré du mélange un ou plusieurs opérateur(s) de création $a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger$ associés aux $\psi_i, \psi_{\bar{i}}$ de la base des états à un corps tel que $\Psi^N(i)$, soit enlevé une (ou plusieurs) paire(s) Γ^\dagger tel que Ψ^{N-1} ,

soit les deux, par exemple $\Psi^{N-1}(i)$. A partir de ces états, il est possible de définir les recouvrements suivants

$$\begin{aligned} I^N(i) &= \langle \Psi^N(i) | \Psi^N(i) \rangle , \\ I^{N-1}(i) &= \langle \Psi^{N-1}(i) | \Psi^{N-1}(i) \rangle , \\ I^N(i, j) &= \langle \Psi^N(i, j) | \Psi^N(i, j) \rangle , \\ I^{N-1}(i, j) &= \langle \Psi^{N-1}(i, j) | \Psi^{N-1}(i, j) \rangle . \\ &\dots \end{aligned} \quad (4.14)$$

La définition formelle de ces recouvrements (Eq. 4.11) n'est pas très adaptée à une utilisation pratique. Toutefois, il est possible d'utiliser des relations de récurrence spécifiques permettant de calculer simplement ces recouvrements.

Relations de récurrence :

En utilisant le fait que $d_i^\dagger = a_i^\dagger a_i^\dagger$ vérifie $(d_i^\dagger)^2 = 0$, nous pouvons montrer que les fonctions d'onde des états PBCS possèdent des propriétés de récurrence particulières[102–105]

$$|\Psi^N\rangle = |\Psi^N(i)\rangle + x_i \sqrt{N} a_i^\dagger a_i^\dagger |\Psi^{N-1}(i)\rangle . \quad (4.15)$$

On voit que cette relation est généralisable à tous les états que nous avons définis plus haut (Eq. 4.13). Il est alors possible d'établir une relation de récurrence équivalente dans le cas des recouvrements associés à ces états. Elle s'écrit

$$I^N = I^N(i) + x_i^2 N I^{N-1}(i) , \quad (4.16)$$

et est vérifiée pour tout i . De même, elle est généralisable à tous les recouvrements que nous avons identifiés dans l'équation (4.14).

$$I^K(i_1, \dots, i_k) = I^K(i_1, \dots, i_k, j) + x_j^2 K I^{K-1}(i_1, \dots, i_k, j) , \quad (4.17)$$

Nous pouvons maintenant obtenir quelques propriétés physiques de ces états projetés. Une particularité de ces polynômes est de respecter l'identité suivante

$$I^N = \sum_i x_i^2 I^{N-1}(i) . \quad (4.18)$$

Expressions des éléments des matrices densités :

D'après l'équation (3.33), l'état PBCS est écrit dans la base canonique de $\hat{\rho}^{[N]}$ qui est identique à celle de l'état BCS d'origine. A l'aide de la relation de récurrence ci-dessus, nous pouvons exprimer la densité à un corps en fonction des recouvrements de la classe d'états définie plus haut. Ainsi, on a

$$\begin{aligned} \rho_{ji}^{[N]} &= \frac{\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_j | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle} \\ &= \frac{1}{I^N} \left[\langle \Psi_{(i,j)}^N | a_i^\dagger a_j | \Psi_{(i,j)}^N \rangle + N x_i x_j \langle \Psi_{(i,j)}^{N-1} | d_j d_i a_i^\dagger a_j d_i^\dagger d_j^\dagger | \Psi_{(i,j)}^{N-1} \rangle \right] , \end{aligned} \quad (4.19)$$

où nous avons utilisé le fait que $\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_j | \Psi^{N-1} \rangle = 0$. Finalement, cela nous permet d'identifier les probabilités d'occupation projetées

$$\rho_{ii}^{[N]} = n_i^N = N x_i^2 \frac{I^{N-1}(i)}{I^N}, \quad (4.20)$$

et donc que $\hat{\rho}^{[N]}$ est bien diagonale. Nous remarquons déjà lors de l'analyse de la régularisation MR-EDF (Eq. 3.33 et 3.34) qu'un état projeté construit à partir d'un vide de quasi-particules écrit dans la base canonique de $\hat{\rho}^1$, conservait cette propriété. Alors, une particularité de la restauration du nombre de particules appliquée à un vide de qp, est de ne pas mélanger les orbitales à un corps ψ_i mais d'agir sur l'organisation des occupations de ces dernières. On voit que la conservation en moyenne du nombre de particules peut être directement vérifiée en utilisant la propriété (Eq. 4.18) des polynômes symétriques. En effet,

$$\sum_i n_i^N = N \frac{1}{I^N} \sum_i x_i^2 I^{N-1}(i) = N \frac{I^N}{I^N} = N. \quad (4.21)$$

De la même façon que pour obtenir l'expression des probabilités d'occupation, nous pouvons donner la forme des contributions non nulles des densités à un et deux corps en fonction des $I^N, I^{N-1}(i) \dots$

$$\begin{aligned} \rho_{ii}^{1[N]} &= \frac{\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_i | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle} = x_i^2 N \frac{I^{N-1}(i)}{I^N}, \\ \rho_{jiji}^{2[N]} &= \frac{\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle} = x_i^2 x_j^2 N(N-1) \frac{I^{N-2}(i, j)}{I^N} \quad \text{si } i \neq (j, \bar{j}), \\ \rho_{jj\bar{i}\bar{i}}^{2[N]} &= \frac{\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_j a_{\bar{j}} | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle} = x_i x_j N \frac{I^{N-1}(i, j)}{I^N} \quad \text{si } i \neq (j, \bar{j}), \\ \rho_{iiii}^{2[N]} &= \frac{\langle \Psi^N | a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_i a_{\bar{i}} | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle} = x_i^2 N \frac{I^{N-1}(i)}{I^N} = n_i^N. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Ce qui nous permet de vérifier une des contraintes du problème à N-corps qui doit être satisfaite lorsque Ψ^N est une valeur propre de \hat{N} . On voit que $\langle (\Delta N)^2 \rangle = 0$ puisque $Tr \hat{\rho}^{2[N]} = N(N-1)$. Cette relation peut être prouvée à l'aide de l'expression (Eq. 4.22) et de la propriété (Eq. 4.18).

Rappelons encore que l'état projeté contient toute l'information sur l'état de référence. En effet, l'équation (2.30) permet de relier les x_i^2 aux v_i^2 et ainsi de reconstruire entièrement l'état BCS du repère intrinsèque. La généralisation des expressions des éléments des matrices densités (un, deux... N-corps) est possible, à l'aide de la relation de récurrence ou des intégrales de jauge[97]. Cela nous permet d'obtenir pour n'importe quel Hamiltonien l'expression de sa valeur moyenne sur la classe d'état PBCS.

Résolution pratique :

Il est possible de rendre explicite ces recouvrements en fonction des nombres d'occupation de l'état projeté que nous notons dès à présent $n_i^N (= \hat{\rho}_{ii}^{[N]})$ et des x_i^2 . En partant des équations de récurrences

suivantes

$$\begin{aligned} I^{N-1}(i) &= I^{N-1}(i, j) + x_j^2 (N-1) I^{N-2}(i, j) , \\ I^{N-1}(j) &= I^{N-1}(i, j) + x_i^2 (N-1) I^{N-2}(i, j) , \end{aligned} \quad (4.23)$$

nous obtenons par addition et par soustraction et en utilisant l'Eq. (4.20), les relations suivantes

$$\begin{aligned} \frac{I^{N-1}(i, j)}{I^N} &= \frac{1}{N} \frac{n_j^N - n_i^N}{x_j^2 - x_i^2} , & \text{Corrélations d'appariement} \\ x_i^2 x_j^2 \frac{I^{N-2}(i, j)}{I^N} &= \frac{1}{N(N-1)} \frac{x_j^2 n_i^N - x_i^2 n_j^N}{x_j^2 - x_i^2} . & \text{Corrélations particule-trou} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Nous pouvons tout de suite retrouver la limite HF lorsque la probabilité d'occupation intrinsèque v_i^2 d'un état i tend vers 1 (alors que $x_i^2 \rightarrow \infty$). Dans ce cas, les éléments de corrélation ci-dessus tendent vers 0 pour la partie appariement et vers n_j^N pour la partie corrélation particule-trou. En fait, on retrouve les corrélations Hartree-Fock car on peut écrire dans ce cas $n_j^N = n_i^N n_j^N$ où nous montrerons ci-après que la probabilité d'occupation projeté associée à l'état i , tend vers 1 dans cette limite.

La simplicité de ces formules en comparaison avec leurs expressions formelles (Eq. 4.12), est très utile en pratique pour calculer numériquement les éléments des matrices densités. En effet, ces éléments de matrice dépendent uniquement de x_i^2 et n_i^N . Les nombres d'occupations peuvent être calculés en utilisant la méthode suivante[103]

1. Partant d'un jeu de $\{x_i^2\}$, on peut d'abord calculer

$$\begin{aligned} I^1 &= \sum_k x_k^2 , \\ I^1(i) &= \sum_{k \neq i} x_k^2 . \end{aligned} \quad (4.25)$$

2. A partir de ces valeurs, tous les I^K et $I^K(i)$ avec $K < N$, peuvent être déduits en utilisant les relations de récurrences suivantes

$$I^K = \sum_i x_i^2 I^{K-1} - (K-1) \sum_i x_i^4 I^{K-2}(i) , \quad (4.26)$$

et

$$I^K(i) = I^K - x_i^2 K I^{K-1}(i) . \quad (4.27)$$

Il est important de noter que cette méthode est puissante et évite d'utiliser l'introduction d'angle de jauge.

Toutefois, un calcul direct des n_i^N est possible en utilisant la méthode de Fomenko, grâce à l'expression suivante

$$n_i^N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{c_N} \frac{1+x_i^2}{1+x_i^2 e^{2i\varphi}} x_i^2 e^{2i\varphi(1-N)}, \quad (4.28)$$

où c_N correspond à la norme de l'état projeté $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-2i\varphi N} \prod_{i>0} (1+x_i^2 (e^{2i\varphi} - 1))$, et donne le même résultat. Cela nous permet de déterminer numériquement l'état PBCS, ses densités, son énergie en fonction des probabilités d'occupation v_i^2 (x_i^2) de l'état BCS de référence. Remarquons, que l'expression des probabilités d'occupation projetées à l'aide de l'intégrale sur les angles de jauge, nous permet de vérifier que lorsque $v_i^2 \rightarrow 1$, on retrouve que la probabilité d'occupation projetée vérifie $n_i^N = 1$. Ceci revient à retirer une paire et l'état à un corps ψ_i à l'état PBCS, i.e. $\Psi^N \rightarrow \Psi^{N-1}(i)$.

Perspectives et remarques sur la spectroscopie des états PBCS :

Nous pouvons aussi dire quelques mots à propos de la spectroscopie associée aux états BCS projetés. A l'instar de l'ansatz Hartree-Fock, l'état PBCS correspond à un état produit de Γ^\dagger , i.e. $\Psi^N = (\Gamma^\dagger)^N$. Il est alors possible de définir des excitations analogues à celles de type particule-trou caractéristiques de la spectroscopie HF. Par exemple, on peut projeter sur le bon nombre quantique de particules les états de quasi-particules $b_i^\dagger |\Psi\rangle = a_i^\dagger |\Psi(i)\rangle$, où b_i^\dagger est un opérateur de création de quasi-particule et $\Psi(i)$ un vide de qp où l'état à un corps ψ_i a été retiré (de façon similaire à la classe d'états projetés définie par l'Eq. 4.13). Ainsi, les premiers niveaux excités d'un noyau pair-pair seraient décrits par des états de deux qp projetés, on a alors

$$|\Psi_{ij}^N\rangle = a_i^\dagger a_j^\dagger P^{N-1} |\Psi(i, j)\rangle = a_i^\dagger a_j^\dagger |\Psi^{N-1}(i, j)\rangle \quad \text{où } i \neq \bar{j}, \quad (4.29)$$

où Ψ_{ij}^N correspond à un état excité. De façon similaire aux excitations HF, nous avons utilisé les degrés de liberté de type particule-trou d'une paire pour construire ce spectre nucléaire. On peut alors écrire l'énergie dans cette approximation

$$E = \langle \Psi^N | \hat{H} | \Psi^N \rangle + \sum_i E_i (a_i^\dagger a_i - a_{\bar{i}}^\dagger a_{\bar{i}}), \quad (4.30)$$

où les E_i , correspondent aux énergies d'excitation, on voit dans cette expression qu'on s'est concentré sur une description de paires de nucléons de spin opposé appariés deux à deux. L'idée ci-dessus a été développée dans le cadre du modèle de séniorité[3].

Les propriétés que nous venons de développer vont nous permettre de dériver l'équation d'Euler-Lagrange associée au principe variationnel appliqué à l'état d'essai PBCS mais aussi de pouvoir construire de façon efficace (numériquement au moins) toutes les densités associées à l'état Ψ^N .

4.2.2 Equations d'Euler-Lagrange du problème

Partant du principe variationnel donné par l'Eq. (2.15), les équations à résoudre sont obtenues en écrivant les variations de l'énergie par rapport aux $\{\psi_i^*\}$ et aux $\{x_i^2\}$ (ou de manière équivalente par rapport aux v_i^2). Les équations en résultant sont données ci-dessous. Tout d'abord, l'expression de l'énergie totale où les dépendances en isospin sont incluses dans la définition des densités, est donnée par

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[n_i^N, \rho^{2[N]}] &= \sum_i t_{ii} n_i^N + \frac{1}{2} \sum_{i,j,j \neq \bar{i}} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} \rho_{jji}^{2[N]} + \frac{1}{4} \sum_{i \neq j, i \neq \bar{j}} \bar{v}_{i\bar{j}j\bar{j}}^{\kappa\kappa} \rho_{jj\bar{i}}^{2[N]} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i (\bar{v}_{iiii}^{\rho\rho} + \bar{v}_{i\bar{i}i\bar{i}}^{\rho\rho}) (n_i^N)^2 + \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}i\bar{i}}^{\kappa\kappa} n_i^N (1 - n_i^N). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Dans le cas d'une interaction de portée nulle de type Skyrme, les éléments d'interaction peuvent être exprimés et regroupés par

$$\bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} = \sum_{\sigma_i \sigma_j} \int d\vec{r} \psi_i^*(\vec{r}, \sigma_i) \psi_j^*(\vec{r}, \sigma_j) \bar{v}^{\rho\rho} \psi_j(\vec{r}, \sigma_j) \psi_i(\vec{r}, \sigma_i), \quad (4.32)$$

où $\sigma_i = \{\uparrow, \downarrow\}$. C'est-à-dire que les états à un corps dégénérés ψ_i et $\psi_{\bar{i}}$ sont regroupés deux à deux. Pour décrire les neutrons et protons, on les repère respectivement par les états à un corps de nombre quantique d'isospin up (\uparrow) et down (\downarrow), ainsi $\psi_i(\vec{r}, \sigma_i) \rightarrow \psi_i(\vec{r}, \sigma_i, \tau_i)$. Nous supposons que l'état à N-corps qui décrit le noyau est séparable dans l'espace d'isospin, i.e. les corrélations neutron-proton sont décrites uniquement dans l'interaction effective (cf. sections 2.1.1.2 et 2.1.3.2). Dans ce cas, l'état PBCS de neutron et de proton s'écrit

$$|\Psi^N\rangle \longrightarrow |\Psi^{N_n}(\tau = \uparrow)\rangle \otimes |\Psi^{N_p}(\tau = \downarrow)\rangle. \quad (4.33)$$

En tenant compte des degrés de liberté d'isospin, les éléments des matrices de corrélations s'écrivent en fonction des nombres d'occupation de l'état projeté Ψ^N et de l'état intrinsèque Ψ (le vide de qp sous-jacent)

$$\begin{aligned} \rho_{jji}^{2[N]} &= \begin{cases} \text{si } \tau_i \neq \tau_j & n_i^N n_j^N, \\ \text{si } \tau_i = \tau_j & \frac{x_j^2 n_i^N - x_i^2 n_j^N}{x_j^2 - x_i^2}, \end{cases} \\ \rho_{jj\bar{i}}^{2[N]} &= x_i x_j \frac{n_i^N - n_j^N}{|x_i|^2 - |x_j|^2} \delta_{\tau_i \tau_j}. \end{aligned}$$

Dans le cadre de ce travail et par analogie à la théorie BCS, la contribution de la dérivé par rapport à ψ_i^* du potentiel d'appariement est négligée. La dépendance en densité traitée dans la suite de ce chapitre, est du type

$$\bar{v}^{\rho\rho}[\rho^{[N]}] \longrightarrow \left(\sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2 n_i^N \right)^\alpha. \quad (4.34)$$

Par soucis de clarté, nous allons dériver les conditions du minimum en considérant une interaction sans dépendance en densité. En fait, cette dernière ne change pas les équations que nous montrons ci-après mais juste l'expression du potentiel effectif (Eq. 4.51).

Condition du minimum pour les états à un corps :

L'application du principe variationnel sur les états à un corps nous permet d'obtenir la condition suivante, par exemple sur les neutrons ce qui nous permet d'alléger les notations en simplifiant la dépendance en isospin

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \psi_k^*(\vec{r})} &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi_k(\vec{r}) n_k^N + \sum_{j \neq k} \psi_j^*(\vec{r}) \bar{v}^{\rho\rho} \psi_j(\vec{r}) \rho_{j k j k}^{2[N]} \psi_k(\vec{r}) \\ &+ \psi_k^*(\vec{r}) \bar{v}^{\rho\rho} \psi_k(\vec{r}) (n_k^N)^2 \psi_k(\vec{r}) - \varepsilon_k n_k^N \psi_k(\vec{r}) = 0 . \end{aligned} \quad (4.35)$$

où le paramètre de Lagrange ε_k impose ici seulement que la norme des états à un corps soit égale à 1² et où le spin est moyenné, i.e. $\psi_i(\vec{r}) \rightarrow \sum_{\sigma_i} \psi_i(\vec{r}, \sigma_i)$. Il est utile de faire le changement de variable $\varepsilon_k = n_k^N \tilde{\varepsilon}_k$. On reconnait que l'égalité ci-dessus est une équation aux valeurs propres vérifiée par les états à un corps ψ_k

$$h_k |\psi_k\rangle = \tilde{\varepsilon}_k |\psi_k\rangle . \quad (4.36)$$

On voit que dans l'approche VAP basée sur des états PBCS, contrairement à la théorie BCS, les états à un corps vérifient des équations aux valeurs propres auto-consistantes couplées entre elles où l'Hamiltonien à un corps dépend de l'état k auquel il s'applique. Ainsi, chaque état à un corps ψ_k doit correspondre à un vecteur propre du Hamiltonien à un corps (local) $\hat{h}_k(\vec{r}, \vec{r})$ défini par

$$h_k(\vec{r}, \vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + \sum_{j \neq k} \psi_j^*(\vec{r}) \bar{v}^{\rho\rho} \psi_j(\vec{r}) \frac{\rho_{j k j k}^{2[N]}}{n_k^N} + \psi_k^*(\vec{r}) \bar{v}^{\rho\rho} \psi_k(\vec{r}) n_k^N , \quad (4.37)$$

avec la valeur propre ε_k et respecter la condition d'orthonormalité de la base des $\{\psi_i\}$. Finalement, il est possible de retrouver la limite de l'approximation de champ moyen et de la théorie BCS. En effet, elle correspond à

$$\rho_{j k j k}^{2[N]} \longrightarrow n_k^N n_j^N , \quad (4.38)$$

et ainsi, les Hamiltoniens effectifs $\hat{h}_k(\vec{r}, \vec{r})$ ne dépendent plus de n_k^N et s'identifient tous au champ moyen \mathcal{H} de la méthode SR-EDF (cf. section 2.1.1.2). Cela assure que la solution de champ moyen est bien incluse dans l'ensemble des solutions du minimum d'une énergie dérivée à partir des BCS projetés.

²La condition d'orthogonalité est respectée par la construction numérique des ψ_i , on a alors $\varepsilon_{ij} \longrightarrow \varepsilon_i$.

Condition du minimum pour les probabilités d'occupation de l'état BCS de référence :

La première étape de la dérivation est de remarquer que les polynômes élémentaires associés aux recouvrements de l'état PBCS sont des fonctions linéaires de x_i^2 , en effet d'après l'équation (4.16) la dérivé partielle de la norme de l'état PBCS par rapport à x_i^2 s'écrit

$$\frac{\partial I^N}{\partial x_k^2} = N I^{N-1}(k), \quad (4.39)$$

cela s'applique également aux $I^N(j)$, $I^{N-1}(i)$... définis dans (Eq. 4.14). A partir de l'équation ci-dessus, nous pouvons très simplement exprimer les dérivés des éléments des matrices densités à un et deux corps intervenants dans l'énergie. Par commodité, nous choisissons de faire cette dérivation par rapport aux probabilités d'occupation de l'état de référence BCS $v_i^2 = \rho_{ii}^1$, notation que nous conserverons par la suite de même que $n_i^N = \rho_{ii}^{1[N]}$ pour les probabilités d'occupation projetées. On obtient alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial n_i^N}{\partial v_k^2} = \frac{1}{v_k^2 u_k^2} \left(\delta_{i,k} n_k^N + (1 - \delta_{ik}) \rho_{kiki}^{2[N]} - n_k^N n_i^N \right), \\ \frac{\partial \rho_{jiji}^{2[N]}}{\partial v_k^2} = \frac{1}{v_k^2 u_k^2} \left(\left(\delta_{jk} (1 - n_k^N) + \frac{x_j^2}{x_j^2 - x_i^2} \right) (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_k^N n_i^N) + (i \leftrightarrow j) \right), \\ \frac{\partial \rho_{jjii}^{2[N]}}{\partial v_k^2} = \frac{1}{v_k^2 u_k^2} \left(\left(\frac{\delta_{jk}}{2} (1 - 2n_k^N) + \frac{x_i x_j}{x_i^2 - x_j^2} \right) (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_k^N n_i^N) + (i \leftrightarrow j) \right), \end{array} \right. \quad (4.40)$$

où la notation $(i \leftrightarrow j)$ indique que le terme précédent où i et j sont intervertis, doit être utilisé. Nous pouvons maintenant procéder à la dérivation. En identifiant l'expression du paramètre de Lagrange $\tilde{\varepsilon}_k$ obtenue ci-dessus, nous pouvons écrire la condition du minimum de l'énergie par rapport aux variations des nombres d'occupation de l'état de référence BCS. Cela donne

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial v_k^2} = \frac{1}{v_k^2 u_k^2} & \left[\tilde{\varepsilon}_k n_k^N (1 - n_k^N) + \sum_{i \neq k} \tilde{\varepsilon}_i (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_i^N n_k^N) \delta_{\tau_i \tau_k} \right. \\ & + \sum_{ij \neq k} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_i^N n_k^N) \frac{x_i^2}{x_j^2 - x_i^2} \frac{n_j^N}{n_i^N} \delta_{\tau_i \tau_j \tau_k} \\ & + \frac{1}{4} \sum_{i \neq k} \bar{v}_{iik\bar{k}}^{\kappa\kappa} \rho_{k\bar{k}i\bar{i}}^{2[N]} (1 - 2n_k^N) \delta_{\tau_i \tau_k} + \frac{1}{2} \sum_{ij \neq k} \bar{v}_{iij\bar{j}}^{\kappa\kappa} (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_k^N n_i^N) \frac{x_i x_j}{x_i^2 - x_j^2} \delta_{\tau_i \tau_k \tau_j} \\ & \left. + \bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}}^{\kappa\kappa} n_k^N (1 - n_k^N) (1 - 2n_k^N) + \sum_{i \neq k} \bar{v}_{i\bar{i}i\bar{i}}^{\kappa\kappa} (1 - 2n_i^N) (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_i^N n_k^N) \delta_{\tau_i \tau_k} \right], \end{aligned} \quad (4.41)$$

Il est à noter que dans la référence [97], une dérivation tout à fait équivalente a été proposée. Toutefois, le formalisme des recouvrements I^N , I^{N-1} , $I^N(i) \dots$ rend la formulation moins versatile que l'écriture que nous proposons ici qui dépend uniquement des x_i^2 et n_i^N . Anticipant l'application numérique, il est

préférable d'utiliser une autre forme de l'équation ci-dessus où le changement de variable suivant

$$\begin{aligned} v_k^2 &\longrightarrow \cos^2(\theta_k) , \\ u_k^2 &\longrightarrow \sin^2(\theta_k) , \end{aligned} \quad (4.42)$$

a été fait. Ainsi, l'énergie dérivée par rapport à θ_k est multipliée par le facteur $2u_k v_k$

$$\frac{\partial E}{\partial \theta_k} = 2u_k v_k \frac{\partial E}{\partial v_k^2} . \quad (4.43)$$

Cette expression à l'avantage de rendre continue la dérivée de l'énergie lorsque $v_k^2 \rightarrow 1$ (respectivement $u_k^2 \rightarrow 0$). En effet, les contributions proportionnelles à $\rho_{\bar{k}k\bar{i}i}^{2[N]} \propto \frac{u_k}{v_k}$ divergent quand elles sont multipliées par $1/(u_k^2 v_k^2)$ mais sont définies dans cette limite quand le facteur multiplicatif est $1/(u_k v_k)$.

On peut retrouver la limite BCS comme un cas particulier de l'équation ci-dessus. En effet, si on prend les éléments de corrélation de l'état BCS, c'est-à-dire

$$\left\{ \begin{array}{ll} n_i^N & \longrightarrow n_i , \\ \rho_{ji\bar{j}\bar{i}}^{2[N]} & \longrightarrow n_i n_j , \\ \rho_{j\bar{j}\bar{i}i}^{2[N]} & \longrightarrow \sqrt{n_i(1-n_i)} \sqrt{n_j(1-n_j)} , \end{array} \right.$$

et que nous les utilisons dans l'équation précédente, nous retrouvons immédiatement les conditions du minimum associées à l'état d'essai BCS

$$\frac{\partial E}{\partial v_k^2} = \varepsilon_k + \frac{1}{4} \frac{(1-2n_k)}{\sqrt{n_k(1-n_k)}} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}k\bar{k}}^{\kappa\kappa} \sqrt{n_i(1-n_i)} . \quad (4.44)$$

Ce qui montre aussi simplement que la limite Hartree-Fock est incluse.

Contrairement au cas de la théorie BCS, il n'est pas possible de donner une forme analytique au minimum de l'état PBCS et nous devons résoudre les équations (4.35) et (4.41) numériquement. Les méthodes utilisées pour donner une solution numérique sont expliquées en détail ci-dessous.

4.2.3 Résolution numérique

Pour résoudre numériquement les Eqs. (4.35) et (4.41), nous sommes repartis de la solution obtenue en sortie des codes déjà existants qui permettent de résoudre les théories EDF avec ou sans corrélations d'appariement, éventuellement du type BCS et/ou BCS avec une optimisation Lipkin-Nogami, pour une interaction de Skyrme dans le canal particule-trou et éventuellement une interaction de contact d'appariement du type de l'Eq. (2.65). Généralement, la solution ainsi obtenue permet, lorsqu'elle est utilisée comme solution initiale, de réduire le coût numérique de la VAP. En effet, le minimum de l'énergie pour un état d'essai PBCS est a priori proche de celui obtenu par une minimisation sous la contrainte

de Lipkin-Nogami. Dans le cadre de ce travail, nous avons utilisé le code ev8 développé par Bonche, Flocard et Heenen[100]. Une solution stable de EDF+BCS+LN est tout d'abord trouvée avec ev8. Dans un deuxième temps, la minimisation de la méthode VAP est faite suivant la procédure décrite dans la figure 4.2. La résolution de la VAP se fait selon les étapes suivantes

- ① **Résolution de ev8** : Le code ev8 résout un problème du type EDF+BCS+LN dans le cas d'une interaction de portée nulle de Skyrme. La méthode de convergence utilisée est de type itérative à partir du principe de propagation en temps imaginaire[32]. Les états à un corps du problème sont discrétisés sur un réseau en trois dimensions avec un maillage rectangulaire de pas $dx = dy = dz = 0.8$ fm. Pour simplifier numériquement les calculs, certaines symétries sont imposées telles que les symétries par rapport aux plans $x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$, ce qui permet de discrétiser les états à un corps ψ_i dans un huitième de l'espace total. Ainsi, chaque ψ_i correspond à une certaine parité par rapport aux trois axes principaux. De plus, de façon consistante avec les équations développées dans ce chapitre, la symétrie par renversement du temps est imposée à chaque état $\psi_i \rightarrow \sum_{\sigma_i} \psi_i(\sigma_i)$, en pratique il est équivalent d'utiliser la symétrie de signature par rapport à un axe (ici l'axe des z) car l'opérateur associé à cette symétrie commute avec l'opérateur de renversement du temps[106]. Finalement, ce programme permet de prendre en compte a priori toutes les déformations paires (car la parité est imposée) et en pratique les déformations monopolaire et quadrupolaire.

La résolution de la VAP intervient après la convergence finale de ev8, de préférence optimisée par la méthode de Lipkin-Nogami qui permet d'obtenir une solution approchée de la VAP.

- ② **Optimisation de l'état BCS** : Avant de faire évoluer les états à un corps, on optimise les probabilités d'occupation intrinsèques de telle sorte à ce qu'elles vérifient à chaque pas en temps les équations d'optimalité de l'énergie par rapport aux x_i^2 (4.41).

On peut partir d'un ensemble de nombre d'occupation de l'état de référence BCS déjà optimisé. Par exemple, en imposant une distribution telle que celle associée au minimum BCS

$$v_i^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_i - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_i - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right), \quad (4.45)$$

où les paramètres λ et Δ sont choisis pour que l'énergie SC-EDF vérifie un minimum. Cette méthode est couramment appelée RVAP pour "Restricted VAP"[90] dans le sens où ici l'espace des variations a été restreint par la distribution imposée des v_i^2 . En pratique, la RVAP permet par exemple de "sortir" du minimum local HF lorsqu'on traite un noyau simple/doublement magique où la minimisation BCS n'a pas pu construire de corrélation d'appariement.

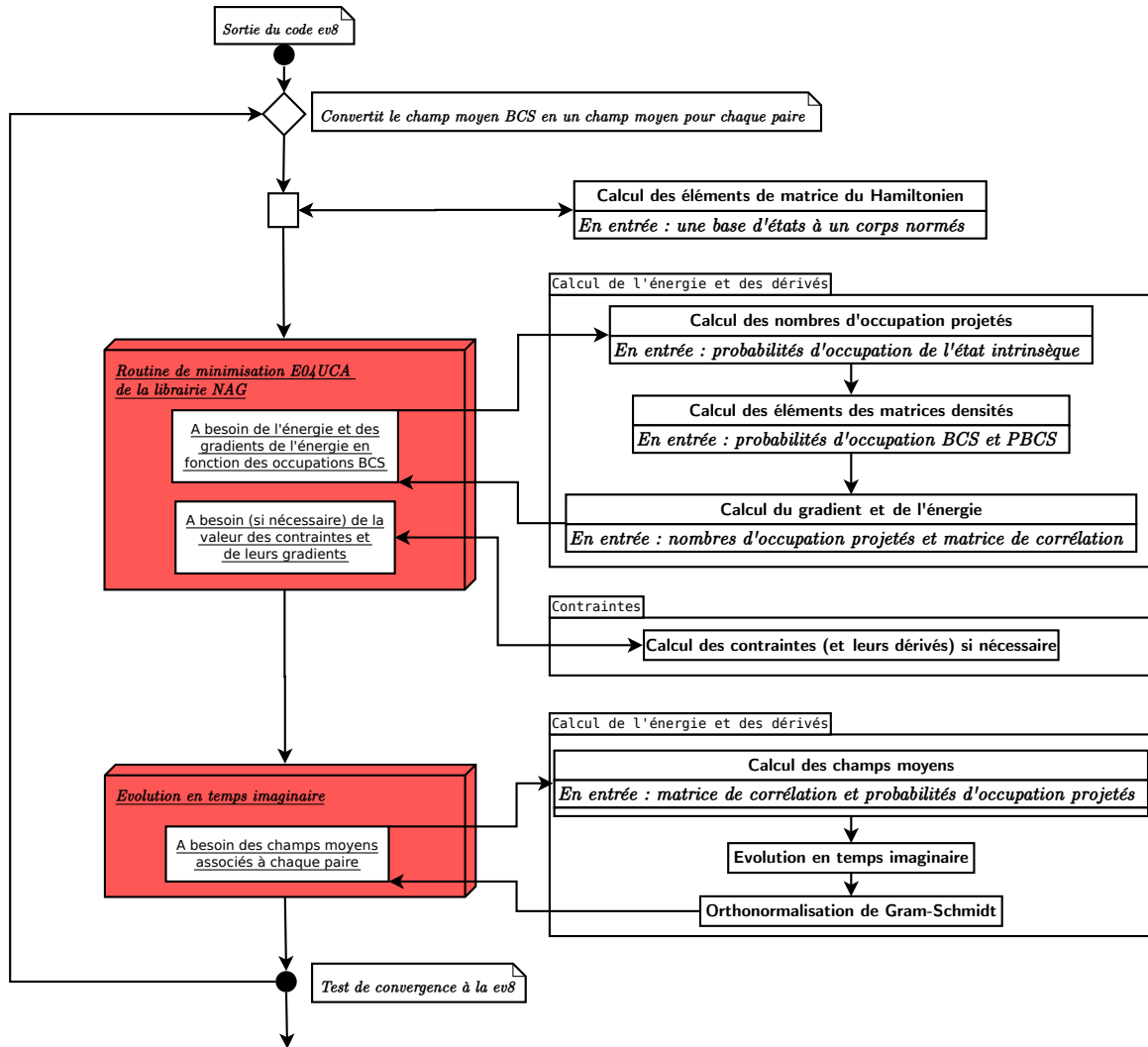


FIG. 4.2: Résumé des étapes numériques utilisées pour résoudre les équations d'Euler-Lagrange associées à la théorie VAP.

Dans ce travail, afin de simplifier la résolution numérique, une des contributions à été négligée

$$\sum_{ij \neq k} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} (\rho_{kiki}^2 [N] - n_i^N n_k^N) \frac{x_i^2}{x_j^2 - x_i^2} \frac{n_j^N}{n_i^N} \delta_{\tau_i \tau_j \tau_k} = 0. \quad (4.46)$$

Alors, la condition que doit vérifier la distribution des v_k^2 devient

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial v_k^2} = \frac{1}{v_k^2 u_k^2} & \left[\tilde{\varepsilon}_k n_k^N (1 - n_k^N) + \sum_{i \neq k} \tilde{\varepsilon}_i (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_i^N n_k^N) \delta_{\tau_i \tau_k} \right. \\ & + \frac{1}{4} \sum_{i \neq k} \bar{v}_{ik\bar{k}}^{\kappa\kappa} \rho_{k\bar{k}i\bar{i}}^{2[N]} (1 - 2n_k^N) \delta_{\tau_i \tau_k} + \frac{1}{2} \sum_{ij \neq k} \bar{v}_{ijj\bar{i}}^{\kappa\kappa} (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_k^N n_i^N) \frac{x_i x_j}{x_i^2 - x_j^2} \delta_{\tau_i \tau_k \tau_j} \\ & \left. + \bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}}^{\kappa\kappa} n_k^N (1 - n_k^N) (1 - 2n_k^N) + \sum_{i \neq k} \bar{v}_{i\bar{i}i\bar{i}}^{\kappa\kappa} (1 - 2n_i^N) (\rho_{kiki}^{2[N]} - n_i^N n_k^N) \delta_{\tau_i \tau_k} \right] . \end{aligned} \quad (4.47)$$

Il faut remarquer que cette prescription est consistante avec l'expression suivante des corrélations de champ moyen $\rho_{ijij}^{2[N]} = n_i^N n_j^N$. L'avantage de cette approximation est ici de pouvoir reconnaître la primitive de cette équation

$$E = \sum_i \tilde{\varepsilon}_i n_i^N + \sum_{ij} \bar{v}_{ijj\bar{i}}^{\kappa\kappa} \rho_{j\bar{j}i\bar{i}}^{2[N]} + \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}i\bar{i}}^{\kappa\kappa} n_i^N (1 - n_i^N) . \quad (4.48)$$

Il est alors possible d'utiliser une méthode de quasi-Newton[107] pour résoudre le système d'équations non-linéaires et trouver le minimum de l'énergie E ci-dessus. Cette méthode numérique est une généralisation de la méthode de la sécante (ou méthode de Newton-Raphson) qui consiste à remplacer le problème par la recherche d'un point fixe d'une suite de $\vec{v}_{\{n\}}^2 = (v_{i_1}^2, \dots, v_k^2, \dots)$ où les v_k^2 sont les probabilités d'occupation de l'état sous jacent BCS et n correspond à l'ordre de la récurrence. De plus, la convergence de la suite est assurée par la relation de récurrence spécifique de la méthode de la sécante. Par exemple, si on cherche à résoudre la condition de point fixe suivante $\vec{\nabla}_{v^2} E = 0$, on pose

$$\vec{v}_{\{n+1\}}^2 - \vec{v}_{\{n\}}^2 = - \frac{\vec{\nabla}_{v^2} E}{\vec{\nabla}_{v^2} \cdot t \vec{\nabla}_{v^2} E} , \quad (4.49)$$

où $\vec{\nabla}_{v^2}$ est la dérivé par rapport à \vec{v}^2 . Cette relation de récurrence est généralisée dans les méthodes de quasi-Newton par

$$\vec{v}_{\{n+1\}}^2 - \vec{v}_{\{n\}}^2 = - \alpha_{\{n\}} B_{\{n\}} E , \quad (4.50)$$

où α_n est optimisé pour que l'énergie décroît et B_n est une matrice symétrique positive qui correspond à une approximation de l'inverse du Hessien de l'énergie et permet ainsi un gain numérique important. L'utilisation de ce type d'outil est possible ici grâce à l'approximation que nous avons faite qui permet de réinterpréter le problème comme une recherche de minimum, ce qui est a priori plus simple que de résoudre les équations non-linéaires initiales. Nous avons vérifié que l'approximation proposée plus haut (Eq. 4.45), est numériquement justifiée. Remarquons qu'une

perspective à court terme, est de traiter à la suite de la minimisation les équations non linéaires sans approximation par une méthode de recherche des zéros, la conjecture de départ étant assurément proche de la solution, ceci devrait permettre une convergence rapide.

- ② Propagation en temps imaginaire des états à un corps : Les solutions des équations aux valeurs propres (4.35) sont obtenues par une méthode de propagation en temps imaginaire. Elle permet de diagonaliser un Hamiltonien en trouvant les vecteurs propres associés aux valeurs propres les plus petites. En pratique, on utilise la méthode de Gram-Schmidt pour imposer la contrainte associée l'orthonormalisation des états à un corps dans le principe variationnel mais également pour sélectionner les vecteurs propres (resp. les valeurs propres $\tilde{\varepsilon}_i$) de plus basse énergie. Elle est appliquée à partir de l'état le plus lié qui est a priori déjà convergé en sortie du code ev8-BCS avec l'optimisation de Lipkin-Nogami. En effet, la VAP peut être vue pour ces états comme une petite perturbation car lorsque $n_i^N \rightarrow 0$ ou $n_i^N \rightarrow 1$, les éléments des matrices densités convergent vers ceux de BCS/HF. La propagation en temps imaginaire est ici numériquement plus coûteuse que dans le cas BCS car il faut calculer et stocker un potentiel à un corps pour chaque état ψ_k de la base des états à un corps. Ce dernier s'exprime par

$$\begin{aligned}
 \bar{v}_k^{eff} = & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + 2B_1 p(k) + 2B_2 p_n(k) + B_3 t(k) + B_4 t_n(k) \\
 & + 2B_5 \Delta p(k) + 2B_6 \Delta p_n(k) + B_7 \left(2\rho^\alpha p(k) + \alpha n_k^N \rho^{\alpha-1} \sum_k p(k) \right) \\
 & + B_8 \left(\alpha \rho^{\alpha-1} \left(\sum_k p_n(k) + \sum_k p_p(k) \right) + 2\rho^\alpha \sum_k p_n(k) \right) \\
 & + B_9 \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(k) + B_{10} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n(k) - iB_9 \vec{\nabla} (p(k) + p_n(k)) \cdot (\langle \sigma_1 | \hat{\sigma} | \sigma_2 \rangle \times \vec{\nabla}_p) ,
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

où

$$\begin{aligned}
 p(k) &= \sum_i \psi_i^* \psi_i \frac{\rho_{kiki}^{2[N]}}{n_k^N} , \\
 p_n(k) &= \sum_i \psi_i^* \psi_i \frac{\rho_{kiki}^{2[N]}}{n_k^N} \delta_{\tau_i \uparrow} ,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho &= \sum_i \psi_i^* \psi_i n_i^N, \\
t(k) &= \sum_i |\vec{\nabla} \psi_i|^2 \frac{\rho_{kiki}^{2[N]}}{n_k^N}, \\
t_n(k) &= \sum_i |\vec{\nabla} \psi_i|^2 \frac{\rho_{kiki}^{2[N]}}{n_k^N} \delta_{\tau_i \uparrow}, \\
\vec{J}(k) &= -i \sum_{i\sigma_1\sigma_2} n_i \psi_{i\sigma_1}^* (\vec{\nabla} \psi_{i\sigma_2}) \times \langle \sigma_1 | \hat{\sigma} | \sigma_2 \rangle \frac{\rho_{kiki}^{2[N]}}{n_k^N}, \\
\vec{J}_n(k) &= -i \sum_{i\sigma_1\sigma_2} n_i \psi_{i\sigma_1}^* (\vec{\nabla} \psi_{i\sigma_2}) \times \langle \sigma_1 | \hat{\sigma} | \sigma_2 \rangle \frac{\rho_{kiki}^{2[N]}}{n_k^N} \delta_{\tau_i \uparrow}. \tag{4.52}
\end{aligned}$$

Bien que la propagation en temps imaginaire n'a pas été proposée pour résoudre les conditions (4.35), qui consistent à trouver un vecteur propre de chaque Hamiltonien effectif à un corps $h_k(\vec{r}, \vec{r}')$ tel que l'ensemble $\{\psi_k\}$ s'identifie à une base orthonormale, ces dernières correspondent à la condition de point fixe de la méthode. Donc, sous réserve de convergence, la propagation en temps imaginaire peut être utilisée dans notre cas. En pratique, la convergence est relativement bien assurée par le fait que les états les plus liés sont déjà convergés et seuls les états proches du niveau de Fermi doivent être optimisés.

③ Cette méthode est ensuite itérée à partir de ① jusqu'à ce que la convergence soit constatée

La résolution numérique de la fonctionnelle SC-EDF est plus contraignante numériquement en particulier au niveau du stockage. Toutefois, cette théorie VAP permet d'améliorer le problème de la description des noyaux doublement magiques où les corrélations d'appariement ne peuvent être prédites précisément par une théorie BCS-LN (cf. figure 5.3).

4.3 Résultats

Dans cette section, nous allons discuter l'application de la VAP auto-consistante. La méthode de résolution proposée ci-dessus est utilisée pour obtenir une solution convergée et pour vérifier que la fonctionnelle SC-EDF permet de décrire l'appariement sous le seuil de la théorie BCS. Dans ce travail, nous n'avons pas pu aller au-delà de la résolution approchée du minimum VAP décrit dans la section précédente. Cependant, les résultats obtenus dans la limite où l'approximation Eq. (4.46) est vérifiée, sont discutés ci-dessus.

L'application de la méthode numérique qui est proposée dans cette thèse, montre qu'il est possible d'obtenir une solution répondant aux critères de convergence du code ev8[100]. Ceci permet de valider l'utilisation de la méthode de propagation en temps imaginaire pour résoudre une série d'équations aux

valeurs propres de la forme de 4.35. Dans la figure 4.3, l'énergie d'appariement est illustrée pour la chaîne isotopique des Kr en fonction du nombre de neutrons. Les résultats obtenus dans le cadre de la théorie BCS (ligne pointillée verte) et de la solution VAP approchée (ligne continue bleue) sont comparés. On voit que les énergies associées aux corrélations d'appariement sont plus élevées dans le cas d'états projetés que dans le cas de vides de qp. Sur cette figure, le cas particulier du ^{76}Kr , où la théorie BCS

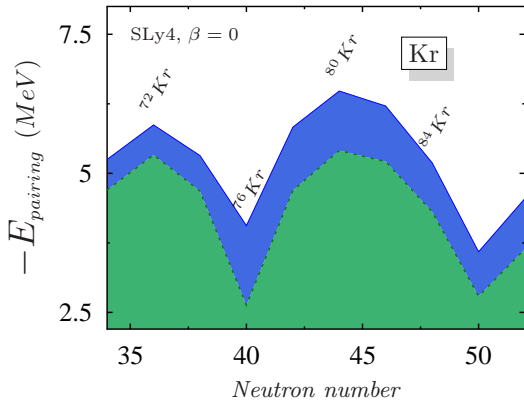


FIG. 4.3: L'énergie d'appariement totale (neutrons et protons) est tracée en fonction du nombre de neutrons pour la chaîne isotopique des Kryptons dans le cadre de la théorie BCS (ligne pointillée verte) et de la solution VAP obtenue à l'aide de la méthode approchée décrite ci-dessus (ligne continue bleue) sous la contrainte $\beta = 0$ correspondant à des noyaux sphériques. L'interaction effective utilisée est de type Skyrme (SLy4) avec une dépendance en densité dans l'interaction d'appariement (Eq. 2.65).

ne prédit pas de corrélation d'appariement pour les neutrons mais a des corrélations non-nulles pour les protons, montre que la méthode VAP permet bien de corriger l'effet de seuil des fonctionnelles BCS.

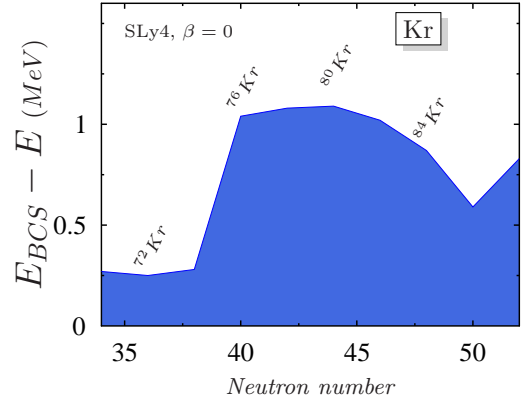
Afin de simplifier la résolution, il est possible d'obtenir une théorie SR-EDF basée sur la fonctionnelle SC-EDF qui ne tient pas entièrement compte des effets de taille finie dans le canal particule-trou. La contexte fonctionnel autorise à faire de tels choix, alors on peut imaginer refitter les paramètres libres de l'interaction dans ce canal. C'est pourquoi nous avons fait le choix de poser

$$\rho_{jiji}^{2[N]} = n_i^N n_j^N, \quad (4.53)$$

et en conservant la forme SC-EDF de la matrice densité à deux corps dans le canal d'appariement, la symétrie de jauge $\mathcal{U}(1)$ n'est que partiellement respectée mais la fonctionnelle devient compatible avec les programmes SR-EDF utilisés en physique nucléaire. En effet, ici tout revient à utiliser un champ moyen normal et à minimiser une expression différente de la fonctionnelle $\mathcal{E}^{\kappa\kappa}$ du canal particule-particule. En comparaison de la théorie BCS utilisée jusqu'à présent pour $\mathcal{E}^{\kappa\kappa}$, la relation (4.24) permet de corriger les effets de seuil. C'est donc une alternative qui suit l'esprit des théories fonctionnelles et est applicable directement en physique nucléaire. Dans le cadre de ce travail, ceci correspond à utiliser la méthode de résolution développée ci-dessous mais de façon exacte puisque l'équation (4.46) est vérifiée si on utilise la relation (4.53) pour définir l'énergie SC-EDF. Cela nous permet de tester que la méthode numérique utilisée dans le cadre de la figure 4.3 pour résoudre les Eqs. (4.35) permet d'obtenir le même

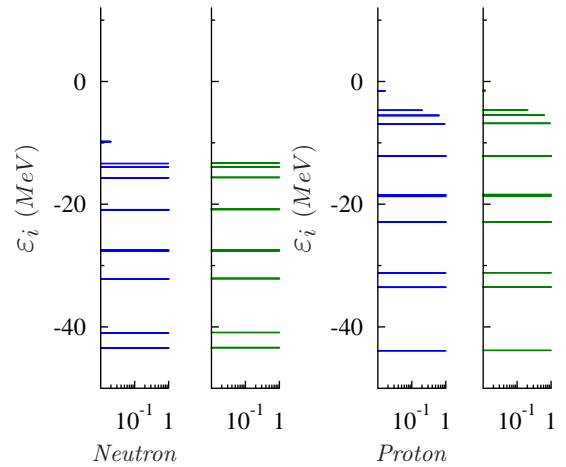
résultat (à quelques dixièmes d'eV) qu'en utilisant le programme ev8. Dans la figure 4.4, nous illustrons que la fonctionnelle SR-EDF que nous proposons d'employer, permet de corriger les effets de seuil de la théorie BCS. En utilisant les mêmes interactions que dans Fig. (4.4), le gain d'énergie obtenu lorsque l'approximation (Eq. 4.46) est vérifiée par rapport à l'énergie BCS, est tracé en fonction du nombre de neutrons pour la chaîne isotopique du Krypton et sous la contrainte $\beta = 0$. On voit sur cette figure que

FIG. 4.4: Le gain d'énergie obtenu lorsque l'approximation (Eq. 4.46) est vérifiée, par rapport à l'énergie BCS est tracée en fonction du nombre de neutrons pour la chaîne isotopique du Krypton et sous la contrainte $\beta = 0$. L'interaction effective utilisée est de type Skyrme (SLy4) avec une dépendance en densité dans l'interaction d'appariement (Eq. 2.65).



le noyau ^{76}Kr , semi-magique, gagne en énergie totale dans tous les cas. La plus grande contribution vient de l'énergie d'appariement des neutrons qui passe, dans le cas BCS, de zéro à $\approx 2\text{MeV}$ lorsque la fonctionnelle pour l'appariement est de type vide de qp projeté. On remarque également que le gain en énergie est moins important proche de la limite de stabilité proton. Cela correspond à l'observation que la distribution des probabilités d'occupation n_i^N fait remonter les énergies à un corps comparativement à BCS et que l'énergie d'appariement ne compense plus autant ce rehaussement dans cette limite. A ce stade de notre étude, il n'est pas possible de proposer des conclusions fermes parce que l'amélioration de la description de l'appariement nécessite de réajuster(refitter) les paramètres des interactions de champ moyen et d'appariement. Dans la figure 4.5, le spectre d'énergies à un corps du ^{76}Kr est pré-

FIG. 4.5: Les énergies à un corps obtenues lorsque l'approximation (Eq. 4.46) est vérifiée (traits bleus), sont multipliées par leur probabilité d'occupation et sont comparées à celles de la théorie BCS (traits verts). L'interaction effective utilisée est de type Skyrme (SLy4) avec une dépendance en densité dans l'interaction d'appariement (Eq. 2.65).



senté pour différentes théories. Les énergies sont multipliées par leur probabilité d'occupation et sont comparées entre celles obtenues avec l'approximation (Eq. 4.53) (lignes vertes) et celles obtenues par la théorie BCS (lignes bleues). Dans le cas des neutrons, on voit que la distribution BCS correspond à un état de particules indépendantes, alors que lorsqu'on utilise la fonctionnelle pour l'appariement associée à la théorie SC-EDF, on trouve que la distribution des probabilités d'occupation est douce, les neutrons sont alors appariés. Sur la figure 4.6 où la quantité $n_i(1 - n_i)$ est tracée en fonction des énergies à un corps dans le cas de l'approximation (lignes bleues) et de la théorie BCS (lignes pointillées vertes), on voit que dans le premier cas, l'appariement des neutrons existe alors que BCS s'identifie à un état de particules indépendantes.

Cette première étude permet de montrer qu'il est possible d'utiliser une théorie basée sur une fonctionnelle SC-EDF et/ou sur une simplification de cette dernière. Dans les deux cas, l'effet de seuil de la théorie BCS est corrigé. La simplification peut être facilement adaptée aux programmes de champ moyen utilisés dans les théories SR-EDF, l'effet principale étant de modifier la distribution des probabilités d'occupation ce qui rehausse les corrélations d'appariement et le spectre des énergies à un corps. Il est important de noter que, dans le cadre EDF, l'utilisation systématique de cette approche nécessite le réajustement des interactions effectives ce qui est en dehors du cadre de cette thèse.

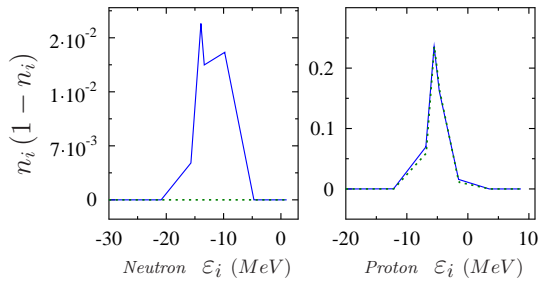


FIG. 4.6: La quantité $n_i(1 - n_i)$ est tracée en fonction des énergies à un corps dans le cas de l'approximation (Eq. 4.46) (lignes bleues) et est comparée à celle de la théorie BCS (lignes pointillées vertes). Les interactions effectives utilisées sont similaires à celles des figures 4.4 et 4.5.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'intérêt d'utiliser un état de vide de qp BCS projeté sur l'espace de Fock de N particules pour décrire les corrélations d'appariement. En effet, lorsque cet état est utilisé dans un principe variationnel, par exemple en minimisant l'énergie SC-EDF, alors le problème de seuil qu'on voit apparaître dans les théories BCS et PAV lorsque la force d'appariement $g/\Delta\varepsilon$ est faible, est résolu et la reproduction de l'énergie de corrélation d'appariement est très bonne, comme on le voit dans la figure 4.1.

Nous avons proposé la première application de la théorie VAP dans le cadre d'une fonctionnelle SC-EDF prenant en compte la brisure et la restauration de la symétrie associée à la conservation du nombre de particules. L'énergie SC-EDF a l'avantage d'être compatible avec une théorie fonctionnelle et inclu auto-

matiquement la régularisation tel que pour la méthode MR-EDF que nous avons vu dans les chapitres précédent. C'est pourquoi nous pouvons utiliser des interactions effectives dépendantes de la densité de l'état projeté tel que la paramétrisation SLy4 de la force de Skyrme. Les propriétés de l'état PBCS qui est l'état auxiliaire de la méthode SC-EDF basée sur un vide de qp, ont été présentées de telle sorte à ce que la dérivation des équations d'Euler-Lagrange du minimum de l'énergie soit explicite. Pour résoudre la VAP, nous avons proposé une méthode numérique permettant de donner efficacement une solution aux équations (4.35) et (4.41) correspondant au minimum de l'énergie SC-EDF.

Enfin, les applications aux isotopes du Krypton ont montré que la théorie SC-EDF, permet de décrire l'appariement de façon améliorée le long de la charte nucléaire, en particulier que le problème de seuil est réglé. Nous avons remarqué que le spectre des énergies à un corps et la distribution des probabilités d'occupation étaient respectivement un peu rehaussée et douce en comparaison à la solution de la théorie BCS. L'énergie de corrélation du canal particule-particule est augmentée en comparaison de BCS et le seuil est corrigé. Finalement, le coût numérique pour utiliser une telle théorie est assez important, c'est pourquoi il faut se poser la question de vérifier si il n'est pas possible d'obtenir une forme fonctionnelle concurrente à celle proposée dans ce chapitre, mais plus simple, ce qui permettrait de réduire le coût numérique et peut être de pouvoir utiliser une telle approche traitant les effets de taille finie dans le cadre de la dynamique et thermodynamique nucléaire.

Construction d'une fonctionnelle de la matrice densité pour l'appariement

Résumé :

La théorie de la fonctionnelle de la matrice densité à un corps est une extension de la DFT qui permet de donner un cadre théorique pour écrire l'énergie d'un système en fonction des probabilités d'occupation et des orbitales naturelles associées. Nous rappelons dans ce chapitre quelques exemples de son utilité en physique nucléaire et en matière condensée, ainsi que les méthodes qui permettent d'établir des formes fonctionnelles décrivant certains phénomènes physiques. Ci-dessous nous nous intéresserons aux cas des corrélations d'appariement. La généralisation du caractère séparable de la fonctionnelle BCS n'a pas permis d'obtenir une expression concurrente, c'est pourquoi nous avons utilisé l'état BCS projeté sur l'espace de Fock de N particules pour construire une nouvelle fonctionnelle DMFT permettant de reproduire efficacement l'énergie et les probabilités d'occupation exactes.

Sommaire

5.1	Introduction sur les théories fonctionnelles de la matrice densité à un corps	99
5.1.1	De la DFT vers la DMFT	99
	Illustration de la théorie DMFT : exemple du gaz d'électrons homogène	101
5.2	Construction de fonctionnelles DMFT au-delà de la théorie BCS	104
5.2.1	La fonctionnelle BCS	104
5.2.2	Historique de l'utilisation de la DMFT en physique nucléaire	106
5.2.3	Théorie basée sur la transformée de Legendre	108

5.2.4	Les méthodes approchées pour restaurer la symétrie	109
5.3	Proposition d'une nouvelle fonctionnelle pour décrire l'appariement . .	112
	Position du problème	112
	Les x_i^2 comme fonctionnelle implicite des n_i^N	113
	Fonctionnelle explicite : développement en $1/N$	116
	Application numérique	118
	Limite Hartree-Fock	119
	Forme compacte d'une fonctionnelle resommée	119
5.4	Conclusion	122

5.1 Introduction sur les théories fonctionnelles de la matrice densité à un corps

Jusqu'à présent, la méthode EDF soit dans sa version avec un seul état de référence (SR-EDF) soit dans sa version avec un ensemble d'états de référence (MR-EDF), a été discutée. Nous avons vu dans le chapitre précédent que la théorie MR-EDF peut être, sous certaines conditions, réinterprétée comme une théorie fonctionnelle des matrices densités à un et deux corps de l'état projeté. Cela a permis de reformuler la brisure et la restauration de la conservation du nombre de particules dans la théorie EDF en une étape unique. Cette théorie a pu être appliquée aux noyaux dans la section 4.3. Une théorie basée sur un état projeté reste néanmoins relativement difficile à mettre en œuvre numériquement. De plus, une énergie fonctionnelle de la densité à deux corps sort clairement du cadre théorique basé sur le théorème de Hohenberg et Kohn discuté brièvement dans le chapitre 2 et que nous rappelons ci-après. Dans ce chapitre, nous allons montrer que la densité à deux corps d'un vide de quasi-particules projeté peut être exprimée comme une fonctionnelle de la matrice densité à un corps et donc, rentre dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la matrice densité (DMFT).

5.1.1 De la DFT vers la DMFT

La théorie fonctionnelle de la densité locale a été proposée initialement par Hohenberg et Kohn[9] afin de reformuler le problème très compliqué de la résolution de l'équation de Schrödinger à N-corps, pour les systèmes d'électrons en interaction, en un problème plus simple. L'idée sous-jacente est de transformer le problème initial en un problème à un corps beaucoup plus facile à résoudre. La solution du problème à un corps doit alors redonner l'énergie exacte du système initial, quitte à perdre de l'information sur certains degrés de liberté. Dans la formulation originale de la DFT, cette simplification est poussée à son maximum. Alors, en plus de l'énergie, seule la partie locale de la densité à un corps peut être reproduite exactement en minimisant une fonctionnelle de cette densité locale. En pratique, cela restreint énormément le nombre de degrés de liberté pouvant être optimisés dans le principe variationnel.

Dans un deuxième temps, Kohn et Sham ont proposé d'introduire un état intermédiaire de Slater à partir d'un ensemble d'états à un corps $\{\psi_i\}$ sur lesquelles la densité locale est décomposée

$$\rho(r) = \sum_i |\psi_i(r)|^2. \quad (5.1)$$

Cette technique offre une solution pratique au problème de minimisation fonctionnelle. Dans la DFT, ces orbitales $\psi_i(r)$ sont utilisées pour réécrire la condition du minimum qui correspond alors à un problème plus simple, la diagonalisation d'un potentiel effectif à un corps. Cependant, ces états à un corps sont fictifs et ne contiennent pas a priori d'information physique sur les orbitales naturelles qui diagonalisent la matrice densité à un corps complète $\hat{\rho}^1(r, r')$. La classe d'observables qui est prédite exactement par la

DFT, est alors réduite aux observables locales à un corps et à l'énergie. Par exemple, l'énergie cinétique exacte qui nécessite la densité à un corps non-locale, ne peut pas être obtenue exactement par cette théorie. En pratique, cela signifie que la fonctionnelle DFT mélange la contribution cinétique avec les termes de corrélation du potentiel à deux, trois... N-corps, c'est-à-dire qu'elle réunit des contributions de nature très différentes. Cela pose un problème pratique lors de la construction de la fonctionnelle puisqu'elle doit prédire des domaines où soit la partie au-delà de l'approximation de particules indépendantes de l'énergie cinétique soit les corrélations dominant. Cela a récemment motivé des travaux en chimie quantique théorique[11, 12]. Dans ce cas, l'idée est connue depuis longtemps et consiste à étendre le principe de la DFT pour obtenir exactement la matrice densité à un corps totale, i.e. $\rho(r) \rightarrow \hat{\rho}^1(r, r')$, permettant ainsi de prédire une classe d'observables plus importante, ici toutes les observables à un corps. C'est la méthode proposée initialement par Gilbert[10] qu'on appelle théorie fonctionnelle de la matrice densité, et où la quantité principale est la matrice densité à un corps $\hat{\rho}^1(r, r')$. Cette approche où à la fois l'énergie et la matrice densité $\hat{\rho}^1(r, r')$ sont prédites, permet de concentrer la description fonctionnelle sur la prédiction des termes d'échange et de corrélation de l'interaction entre les électrons (resp. nucléons) seulement. En effet, la contribution de type Hartree-Fock à la fonctionnelle est automatiquement prédite et a fortiori la forme fonctionnelle de la contribution cinétique totale est connue.

Utiliser une théorie DMFT augmente la complexité en comparaison de la DFT. De manière similaire à cette dernière, la matrice densité $\hat{\rho}(r, r')$ est décomposée sur les états à un corps ψ_i , dans sa base canonique, ce qui s'écrit

$$\hat{\rho}^1 = \sum_i n_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (5.2)$$

où les n_i , sont les probabilités d'occupation des nucléons sur les orbitales ψ_i . Il est important de noter que cette fois-ci les états à un corps ne sont plus des quantités intermédiaires mais correspondent aux orbitales naturelles "physiques" qui diagonalisent la densité exacte $\hat{\rho}^1(r, r')$ du problème à N-corps. De plus, ici toutes les observables à un corps peuvent être décrites, contrairement au cas de la DFT, où seules les observables locales peuvent être calculées. L'information contenue dans les dépendances fonctionnelles de l'énergie est donc plus importante dans le cas de la DMFT que dans le DFT, et l'énergie devient une fonctionnelle des n_i et des ψ_i

$$\mathcal{E}[\psi_i] \xrightarrow{\text{DFT} \rightarrow \text{DMFT}} \mathcal{E}[n_i, \psi_i], \quad (5.3)$$

L'avantage de cette théorie est qu'elle permet d'identifier d'une part les contributions fonctionnelles exactes Hartree-Fock et cinétique à l'énergie, et d'autre part d'enrichir la description fonctionnelle des corrélations, par exemple en utilisant des cas limites où ces contributions sont bien connues en fonction des nombres d'occupation. Toutefois, il faut garder à l'esprit qu'en augmentant la quantité d'information prédite par la théorie fonctionnelle, celle-ci devient un peu plus difficile à mettre en œuvre, il est alors

nécessaire de s'assurer qu'elle permet toujours, en pratique, d'être appliquée à des systèmes de grande échelle par exemple, en physique nucléaire, sur l'ensemble de la charte de noyaux.

Illustration de la théorie DMFT : exemple du gaz d'électrons homogène Le gaz d'électrons homogènes joue dans le domaine des systèmes électroniques un peu le même rôle que la matière nucléaire infinie dans les systèmes nucléaires. Ce modèle a pour unique paramètre la densité électronique $\rho \equiv N/V$ et correspond à la limite thermodynamique de N électrons dans une boîte de volume V , c'est-à-dire qu'on prend $N, V \rightarrow \infty$ avec N/V constant. Ce modèle a aussi souvent servi de point de départ pour valider des théories à N-corps[108] et/ou pour tester des formes de DMFT applicables aux systèmes électroniques. En particulier, une solution exacte peut être obtenue numériquement par exemple en utilisant les méthodes de Monte-Carlo [109], ce qui permet d'évaluer les fonctionnelles DMFT. Quelques exemples sont illustrés ci-dessous.

L'énergie d'un système soumis à une interaction Coulombienne peut être écrite de manière générale sous la forme

$$E = -\frac{1}{2} \sum_i n_i \int dr \psi_i^*(r) \vec{\nabla}_\triangleleft \frac{\hbar^2}{m} \vec{\nabla}_\triangleright \psi_i(r) + \int dr V(r) \rho(r) + \int dr_1 dr_2 \frac{\hat{\rho}^2(r_1, r_2)}{|r_1 - r_2|}, \quad (5.4)$$

où les deux premiers membres de cette équation correspondent à l'expression exacte de l'énergie cinétique et du potentiel extérieur dans la base canonique de $\hat{\rho}^1$, et où r représente le spin et la position de tel sorte à ce que l'intégration se fasse selon toutes les positions et tous les états de spin. Quant au dernier terme de droite, il correspond à la contribution de l'interaction coulombienne entre deux électrons. Afin d'obtenir une théorie DMFT, il faut donc exprimer la densité à deux corps comme une fonctionnelle de celle à un corps, où de manière alternative comme une fonctionnelle des nombres d'occupation n_i et des orbitales ψ_i . Dans ce cadre, un certain nombre de travaux ont proposés des dépendances variées. Nous donnons, ci-dessous, quelques exemples :

1. La forme fonctionnelle ci-dessous a été proposée par Müller[110] et consiste à généraliser les relations simples qui existent entre les densités à un et deux corps au niveau Hartree-Fock, par exemple à partir de $\rho_{lkji}^2 = \rho_{li}^1 \rho_{kj}^1 - \rho_{lj}^1 \rho_{ki}^1$. Müller a suggéré de conserver l'expression de la partie directe de cette relation et de généraliser la partie d'échange et de corrélation par $(n_i n_j)^{\frac{1}{2}}$ en montrant que cet exposant est celui qui correspond aux énergies les plus petites, donc a priori une extension naturelle de la relation HF. Certaines relations doivent alors être vérifiées pour prendre en compte correctement le problème à N-corps tel que $\hat{\rho}^1 = \frac{1}{N-1} Tr \hat{\rho}^2$. La densité à deux corps

s'exprime finalement par

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^2(r_1, r_2) &= \rho(r_1)\rho(r_2) && \text{Hartree} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sqrt{n_i n_j} \psi_i(r_1) \psi_j(r_1) \psi_i(r_2) \psi_j(r_2) .\end{aligned}\quad (5.5)$$

2. Csányi et Arias[111] ont proposé une généralisation du développement des dépendances fonctionnelles précédent en utilisant un produit tensoriel d'observables à un corps pour exprimer la matrice de corrélation à deux corps. Le point de départ est

$$\rho_{lkji}^2 = \rho_{li}^1 \rho_{kj}^1 - \rho_{lj}^1 \rho_{ki}^1 + g_{li} \otimes g_{kj} . \quad (5.6)$$

Lorsqu'on utilise la relation $\hat{\rho}^1 = \frac{1}{N-1} Tr \hat{\rho}^2$, cela donne la condition suivante

$$g^2 - g Tr g = \hat{\rho}^1 (1 - \hat{\rho}^1) . \quad (5.7)$$

Ainsi une solution possible, lorsqu'on se place dans la base canonique de $\hat{\rho}^1$, est d'utiliser l'expression $g_{il} = \delta_{il} n_i (1 - n_i)$ pour construire la dépendance de la matrice de corrélation à deux corps. En faisant ce choix, on obtient l'expression suivante

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^2(r_1, r_2) &= (1 - P_{r_1 r_2}) \rho(r_1) \rho(r_2) && \text{Hartree-Fock} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sqrt{n_i (1 - n_i) n_j (1 - n_j)} \psi_i(r_1) \psi_j(r_1) \psi_i(r_2) \psi_j(r_2) .\end{aligned}\quad (5.8)$$

3. Une dernière possibilité proposée par Csányi, Goedecker et Arias[112] est de mélanger les dépendances fonctionnelles proposées ci-dessus tout en vérifiant les conditions du problème à N-corps. Ils ont ainsi proposé la fonctionnelle suivante

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^2(r_1, r_2) &= \rho(r_1) \rho(r_2) && \text{Hartree} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sqrt{n_i (2 - n_i) n_j (2 - n_j)} \psi_i(r_1) \psi_j(r_1) \psi_i(r_2) \psi_j(r_2) ,\end{aligned}\quad (5.9)$$

et ont montré qu'elle permettait de reproduire très précisément l'énergie exacte du gaz d'électrons homogène.

La figure 5.1 illustre l'application de la DMFT dans le cadre du modèle du gaz d'électrons homogène avec, en particulier, les fonctionnelles discutées ci-dessus. Ces exemples de proposition montrent la diversité des fonctionnelles qui peuvent être utilisées ainsi que la manière dont elles ont été motivées. En pratique, une fois qu'une fonctionnelle est donnée en terme de dépendances en n_i et en ψ_i , l'énergie

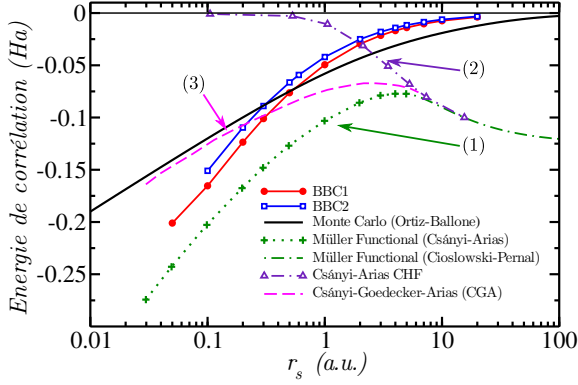


FIG. 5.1: L'énergie de corrélation du gaz d'électrons homogène est calculée en fonction du rayon r_s (en unité de distance atomique) correspondant à la densité volumique $\rho = 3(8\pi r_s^3)^{-1}$ du gaz d'électrons libres. On compare l'énergie de corrélation obtenue à partir de la minimisation de différentes fonctionnelles de la matrice densité à la solution exacte calculée avec des simulations Monte-Carlo par Perdew et Wang[109] (ligne continue noir en gras) à partir des travaux de Ortiz et Ballone [113]. Les trois fonctionnelles discutées dans le texte sont référencées par (1), (2) et (3). Cette figure est adaptée à partir de la référence [114].

doit être minimisée sous certaines contraintes. Si on prend en compte la conservation du nombre de particules et le fait que la base d'états à un corps est orthonormale, on doit minimiser l'énergie suivante

$$\mathcal{F}[n_i, \psi_i] = \mathcal{E}[n_i, \psi_i] - \lambda (Tr \hat{\rho}^1 - N) - \sum_{ij} \varepsilon_{ij} (\langle \psi_i | \psi_j \rangle - \delta_{ij}), \quad (5.10)$$

par rapport aux variations des n_i et des ψ_i . Les énergies de corrélation (en Hartree) sont obtenues à partir des minimisations de fonctionnelles DMFT en fonction du rayon r_s (en unité de distance atomique) correspondant au vecteur de Fermi $k_F = (9\pi/4)^{1/3} r_s^{-1}$ du gaz d'électrons libres. Les énergies résultant des fonctionnelles discutées plus haut sont repérées par les flèches et les numéros correspondant au texte. Les énergies DMFT présentées dans cette figure, sont comparées à la solution exacte calculée avec des simulations Monte-Carlo par Perdew et Wang[109] à partir des travaux Ortiz et Ballone[113]. On voit sur cette figure que les fonctionnelles DMFT proposées en matière condensée permettent une reproduction satisfaisante de l'énergie de corrélation ab-initio, soit sur une gamme donnée soit pour toutes les valeurs de la densité du gaz d'électrons. En particulier, pour certaines, elles prédisent correctement la limite de dissociation moléculaire ($r_s \rightarrow 0$). Ce caractère a rendu leur utilisation populaire en matière condensée.

Dans la suite de ce chapitre, la possibilité d'utiliser la DMFT pour décrire les corrélations d'appariement est discutée.

5.2 Construction de fonctionnelles DMFT au-delà de la théorie BCS

Nous allons voir que l'ansatz proposé par Bardeen, Cooper et Schrieffer permet de décrire les effets de l'appariement sur le spectre d'excitation d'un système à N-corps et d'obtenir une énergie associée à un état de référence qui dépend explicitement des états à un corps et des probabilités d'occupation associées. Cette théorie peut donc être interprétée comme une théorie fonctionnelle DMFT. On remarque ainsi qu'il est possible d'inclure certaines corrélations en particulier des corrélations collectives très dépendantes du nombre de nucléons telles que l'appariement, à l'aide de fonctionnelles aux dépendances spécifiques en terme de probabilités d'occupation (BCS en est un exemple) tout en gardant les possibilités offertes par la DFT qui permettent entre autres de décrire les corrélations de milieu via des interactions effectives. En physique nucléaire, c'est la méthode utilisée au niveau SR-EDF. Nous verrons dans la suite, comment il est possible d'enrichir les dépendances fonctionnelles de l'énergie pour pouvoir décrire les effets associés à la restauration de la conservation du nombre de particules.

5.2.1 La fonctionnelle BCS

Les applications proposées dans ce chapitre pour valider la précision des fonctionnelles, sont à l'instar du gaz d'électrons homogène, réalisées dans le cadre d'un modèle où il existe une solution exacte. Dans la suite de ce chapitre, nous nous intéresserons au modèle de Richardson dont quelques propriétés sont détaillées dans le chapitre 6. Il est conçu pour décrire la physique associée à l'appariement en proposant de considérer l'Hamiltonien dit de Richardson ou de pairing qui s'écrit

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i n_i - g \sum_{ij} a_i^\dagger a_i^\dagger a_j a_{\bar{j}} , \quad (5.11)$$

où on somme les états à un corps de spin up dont les indices i sont positifs. Cette convention est adoptée dans la suite de ce manuscrit. Les ε_i sont les énergies à un corps et g correspond à la constante d'appariement (ou constante de couplage). Dans la suite de ce chapitre, nous considérons un espace-temps constant entre les énergies à un corps, dénoté par $\Delta\varepsilon$. Cet Hamiltonien a l'avantage de pouvoir être diagonalisé numériquement, à partir des équations de Richardson, quelle que soit la valeur de g et jusqu'à un nombre de paires très grand[115]. C'est pourquoi, ce modèle, est tout à fait adapté pour tester des propositions de fonctionnelles traitant l'appariement dans le cadre de la DMFT.

Le lien entre la théorie BCS et la théorie DMFT est discuté plus en détails ci-dessous. Par analogie avec l'Eq. (4.15), on montre[8, 102, 116] que l'état BCS définit par

$$|\Psi\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |-\rangle , \quad (5.12)$$

vérifie

$$|\Psi\rangle = |\Psi(i)\rangle + \sqrt{\frac{n_i}{1-n_i}} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger |\Psi(i)\rangle , \quad (5.13)$$

où l'état BCS Ψ est normé, la densité à un corps associée est diagonale et ses valeurs propres sont les n_i et la norme des états $\Psi(i)$ vérifie $\langle \Psi(i) | \Psi(i) \rangle = 1 - n_i$. A partir de cette équation, il est possible de retrouver une relation analogue au point de départ de Müller puisque les éléments de la matrice densité à deux corps associés aux états BCS/HFB vérifient

$$\rho_{lkji}^2 = \delta_{li}\delta_{kj} n_i n_k - \delta_{lj}\delta_{ki} n_i n_k + \delta_{ij}\delta_{lk} \sqrt{n_i(1-n_i)} \sqrt{n_k(1-n_k)}, \quad (5.14)$$

qui est obtenue directement à partir de l'équation (5.13).

On obtient alors dans le cas d'un Hamiltonien à deux corps, l'énergie fonctionnelle des n_i suivante

$$\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \sum_i t_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij} n_i n_j + \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} \sqrt{n_i(1-n_i)} \sqrt{n_j(1-n_j)}. \quad (5.15)$$

On remarque que l'énergie s'écrit sous une forme très simple en particulier à cause du caractère séparable de l'expression des matrices densités à un et deux corps dans les canaux de particule-trou et particule-particule. L'énergie obtenue dans le cadre de la théorie BCS est bien une fonctionnelle des nombres d'occupation et des orbitales associées. Finalement, on voit que partant d'une théorie BCS, on obtient le schéma suivant

$$|\Psi\rangle \longrightarrow \{n_i, \psi_i\} \longrightarrow \mathcal{E}[n_i, \psi_i]. \quad (5.16)$$

L'utilisation combinée de la théorie BCS et du principe variationnel donné ci-avant conduit à l'équation aux variations par rapport aux n_k suivante

$$\frac{\partial E}{\partial n_k} = \varepsilon_k + \frac{(1-2n_k)}{\sqrt{n_k(1-n_k)}} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}k\bar{k}} \sqrt{n_i(1-n_i)}, \quad (5.17)$$

où ε_k correspond au paramètre de Lagrange associé à l'orthonormalisation de la base des états à un corps. La résolution de cette équation est directe. En introduisant le paramètre

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_i \bar{v}_{i\bar{i}k\bar{k}} \sqrt{n_i(1-n_i)}, \quad (5.18)$$

qui correspond au gap du spectre d'excitation BCS, on obtient l'expression suivante des nombres d'occupations

$$n_k = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta_k^2}} \right), \quad (5.19)$$

où λ est l'énergie de Fermi et correspond au paramètre de Lagrange nécessaire pour imposer le bon nombre de particules en moyenne. La théorie BCS est un exemple concret où une théorie Hamiltonienne peut être directement interprétée dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la matrice densité. La

quantité importante est alors la densité à un corps totale $\rho^1 = \sum_i n_i |\psi_i|^2$. Dans le cas de BCS, il est possible d'identifier l'état à N-corps à un état auxiliaire, un vide de quasi-particules, associé à la fonctionnelle DMFT définie par l'équation (5.15). Il est important de noter de nouveau que, en physique nucléaire, la théorie EDF est très proche du cas Hamiltonien (cf. section 2.1.3.2). En particulier, le niveau SR-EDF basé sur l'état BCS a été et reste toujours largement utilisé[117–119]. Lorsque des interactions effectives dans les canaux de champ moyen et d'appariement sont prises en compte, l'expression de l'énergie ci-dessus se transforme en

$$\mathcal{E}[n_i, \psi_i] = \sum_i t_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\rho\rho} n_i n_j + \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij}^{\kappa\kappa} \sqrt{n_i(1-n_i)n_j(1-n_j)} . \quad (5.20)$$

On voit bien que cette fonctionnelle rentre dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la matrice densité. Ainsi, on s'attend à pouvoir décrire également les observables à un corps non locales en position dans les théories basées sur la méthode SR-EDF. Nous pouvons alors suivre la philosophie utilisée en DMFT en remplaçant la densité à deux corps par ces dépendances spécifiques en fonction des probabilités d'occupation, voire en généralisant soit la relation (5.13) soit la relation (5.14). Dans la suite de ce chapitre, nous proposons de développer ces deux idées.

5.2.2 Historique de l'utilisation de la DMFT en physique nucléaire

Nous avons vu précédemment que la théorie BCS ne permet ni de décrire précisément les valeurs propres de la densité à un corps, ni les corrélations résiduelles le long de la chaîne des noyaux. En effet, les figures 2.3 et 4.1 montrent que dans la limite d'une faible force d'appariement, la fonctionnelle BCS ne prédit pas les corrélations associées à la conservation du nombre de particules. Historiquement, un des tout premiers à avoir interprété la théorie BCS comme une théorie fonctionnelle des n_i et ψ_i fut Vautherin[99], peu de temps après avoir introduit l'utilisation des forces de Skyrme pour décrire les propriétés statiques des noyaux[50]. Dans son article [99], il a noté que les dépendances, associées à la théorie BCS, de l'énergie en fonction des n_i constituent une des formes possibles pour exprimer l'énergie nucléaire mais qu'elles pouvaient toutefois être modifiées. L'idée de réviser les dépendances en n_i associées à la fonctionnelle BCS dans le but d'améliorer la description des noyaux lorsque l'interaction d'appariement est faible, sans toutefois s'attaquer au problème de vérifier le bon nombre de particules, est souvent l'angle d'approche privilégié. Par exemple, Vautherin a proposé de la même façon que Csányi et Arias[111, 112], de conserver le caractère séparable de l'équation (5.13) obtenue dans le cadre de la théorie BCS, c'est-à-dire en prenant

$$\rho_{lkji}^2 = \delta_{li}\delta_{kj} n_i n_k - \delta_{lj}\delta_{ki} n_i n_k + \delta_{ij}\delta_{lk} f(n_i)f(n_j) . \quad (5.21)$$

Alors, pour construire une fonctionnelle DMFT optimisée pour décrire certains phénomènes physiques, on a le choix de déterminer l'expression de f en fonction des n_i . Vautherin a proposé de paramétrer cette

fonction à partir de la distribution des nombres d'occupation, par exemple de façon à ce que la distribution exacte soit reproduite. Ainsi, cela revient à généraliser la fonctionnelle BCS en écrivant l'énergie comme

$$\mathcal{E}[n_i, \psi_i] = \sum_i t_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{v}_{ijij} n_i n_j + \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} f(n_i) f(n_j) . \quad (5.22)$$

Dont la solution au minimum de l'énergie doit vérifier les contraintes suivantes

$$0 \leq n_i \leq 1 ,$$

et

$$\sum_i n_i = N , \quad (5.23)$$

la première est une condition qui peut être respectée par f , par construction, et peut éventuellement servir de guide pour déterminer les dépendances en n_i . L'application des variations par rapport aux probabilités d'occupation à l'énergie ci-dessous, nous donne la relation suivante

$$n_k = f'^{-1} \left(\frac{\varepsilon_k - \lambda}{\Delta_k} \right) . \quad (5.24)$$

Ainsi, on peut associer à la fonction f , la fonction de distribution des nombres d'occupation. Donc, on peut postuler une distribution des nombres d'occupation vérifiant les contraintes données ci-dessus et en dériver la fonctionnelle associée. Vautherin a discuté plusieurs exemples :

$$\begin{aligned} n_k &= \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon_k - \lambda}{\Delta_k}}} \quad \textcircled{1} , \\ n_k &= \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\varepsilon_k - \lambda}{\Delta_k} \right) \right] \quad \textcircled{2} , \end{aligned} \quad (5.25)$$

de façon similaire, on peut proposer

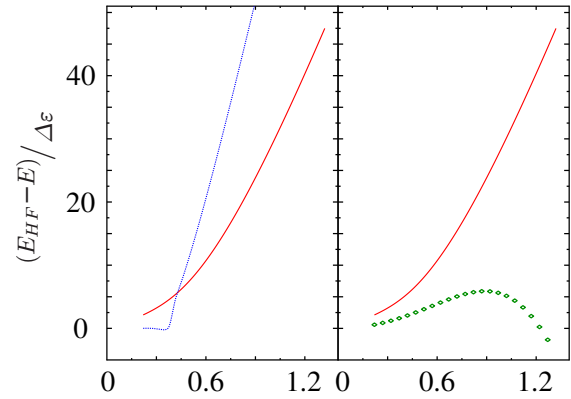
$$n_k = \frac{1}{\pi} \left[\arctan \left(-\frac{\varepsilon_k - \lambda}{\Delta_k} \right) + \frac{\pi}{2} \right] \quad \textcircled{3} , \quad (5.26)$$

...

Lors de cette thèse, les fonctionnelles ont été testées et optimisées dans le cadre du modèle de Richardson avec pour but de reproduire l'énergie et la distribution des probabilités d'occupation exactes obtenues à partir de la solution proposée par Richardson[13, 95, 96]. Cela revient à trouver une forme fonctionnelle de l'énergie en fonction des n_i qui améliore l'approche BCS en prenant en compte les effets de taille finie très importants lorsque la force d'appariement $g/\Delta\varepsilon \rightarrow 0$ tout en décrivant correctement l'énergie d'appariement exacte dans des cas de couplage intermédiaire et fort. Des exemples de résultats sont donnés dans la figure 5.2 pour les fonctionnelles associées aux distributions ① et ③ dans le

cas du modèle de Richardson. Nous avons remarqué qu'il est très difficile de reproduire avec une précision au moins équivalente à la fonctionnelle BCS, en ce qui concerne la reproduction de l'énergie et des nombres d'occupation exacts. En particulier, aucune des fonctionnelles dérivées à partir des distributions ① à ③ proposées ci-dessus ne remplissent les critères requis pour améliorer la description de l'appariement. Bien qu'il semble difficile d'augmenter le pouvoir prédictif de la fonctionnelle avec cette méthode, les travaux présentés dans la ref. [99] restent toutefois très intéressants car ils sont parmi les premiers en physique nucléaire où l'hypothèse d'utiliser des fonctionnelles des n_i différentes de la proposition de BCS a été émise (et ceci avant même la proposition de Gilbert).

FIG. 5.2: Comparaison entre l'énergie de corrélation, normalisée par $\Delta\varepsilon$, exacte (ligne continue rouge), (gauche) la fonctionnelle associée à la distribution ① des n_i (ligne pointillée bleue), et (droite) celle associée à la distribution ③ (losanges verts), en fonction de la force d'appariement normalisée $g/\Delta\varepsilon$.



5.2.3 Théorie basée sur la transformée de Legendre

Plus récemment, Papenbrock a utilisé une méthode alternative qui permet d'obtenir une forme fonctionnelle de l'énergie en fonction des probabilités d'occupation[120]. Le principe est que si on connaît l'expression de l'énergie d'un système en fonction des énergies ε_i associées aux états à un corps ψ_i , c'est-à-dire si on sait écrire la fonctionnelle suivante

$$E = \mathcal{E}[\varepsilon_i], \quad (5.27)$$

alors il est possible de déterminer la fonctionnelle DMFT correspondante. Partant du principe variationnel

$$F[n_i] = \mathcal{E}[n_i] - \sum_k n_k \varepsilon_k \left(\int dr |\psi_i(r)|^2 - 1 \right) \quad (5.28)$$

on a au minimum que

$$n_i = \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_i}. \quad (5.29)$$

Nous pouvons alors utiliser une transformation de Legendre pour obtenir une fonctionnelle des nombres d'occupation à partir de celle connue en fonction des énergies à un corps. Ainsi,

$$\mathcal{E}[n_i] = \mathcal{E}[\varepsilon_i] - \sum_k n_k \varepsilon_k \quad (5.30)$$

On voit que le point de départ de cette approche est d'avoir déjà écrit l'énergie comme une fonctionnelle des ε_i . En pratique, cela nécessite l'utilisation d'une théorie spécifique telle que celle de la réponse de petite amplitude (RPA) ou celle de BCS qui permet d'inclure des corrélations au-delà du champ moyen. Cela a été fait par exemple dans la référence [121] pour la théorie RPA et dans la référence [120] pour celle de la BCS. Dans cette dernière, une énergie DMFT a été également obtenue pour traiter l'appariement dans le cas de fort couplage en utilisant la théorie effective des champs.

L'un des avantages de cette approche est de pouvoir parfois obtenir des formes explicites des dépendances de l'énergie en fonction des n_i si l'Eq. (5.30) peut être inversée. Le désavantage est que si on a déjà la fonctionnelle $\mathcal{E}[\varepsilon_i]$ alors on a déjà résolu le problème et la nécessité d'obtenir une fonctionnelle DMFT devient moins évidente. Nous avons constaté au cours de nos travaux sur ce sujet, qu'il était soit difficile d'inverser les dépendances fonctionnelles $\varepsilon_i \rightarrow n_i$, soit les fonctionnelles construites à partir de dépendances dans les énergies à un corps n'étaient valides que dans des cas limites ce qui rend la démarche peut valorisante pour corriger par exemple les effets de taille finie et prédire l'énergie d'appariement sur une gamme importante en terme de la quantité $g/\Delta\varepsilon$. Toutefois, le principe énoncé ici reste très intéressant car c'est un moyen très général pour guider dans le choix des fonctionnelles de la matrice densité.

5.2.4 Les méthodes approchées pour restaurer la symétrie

En physique nucléaire, un certain nombre de méthodes existent pour restaurer complètement/partiellement les symétries. Dans le cas qui nous intéresse, la symétrie de jauge $\mathcal{U}(1)$, elles permettent de prendre en compte les effets de taille finie et donc d'améliorer la description de l'énergie. Dans cette section, nous cherchons à donner un aperçu de ces différentes méthodes qui permettent soit de prendre en compte la restauration de la symétrie de jauge de façon approchée, soit modifiant la fonctionnelle pour optimiser l'espace variationnel projeté. Une des méthodes est d'utiliser le développement de Kamlah[122] pour obtenir une approximation de l'énergie projetée. Cette technique permet de réécrire l'énergie projetée en fonction des valeurs moyennes évaluées avec l'état de référence brisant la symétrie, multiplié par les fluctuations de l'opérateur associé. Par exemple, dans le cas de la symétrie de jauge, on réécrit l'énergie projetée en fonction des fluctuations $\Delta N = \hat{N} - \langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle$. En pratique, on fait un développement de Taylor de l'intégrant $\mathcal{E}(\rho^{0\varphi}, \kappa^{0\varphi})$ qui rentre dans l'expression de l'énergie projetée, évaluée à partir de l'Eq. (3.1) par rapport à l'angle de jauge φ au voisinage de 0. Finalement, cela revient au développement suivant

$$\langle \Psi^N | \hat{H} | \Psi^N \rangle = \sum_n h_n \langle \Psi | (\Delta N)^n | \Psi \rangle, \quad (5.31)$$

où les coefficients peuvent être exprimés en résolvant un système d'équations obtenu à partir du développement ci-dessus dans le cas d'observables telles que $\langle \Psi | \hat{H} \Delta N | \Psi \rangle$, $\langle \Psi | \hat{H} (\Delta N)^2 | \Psi \rangle$... On peut

remarquer que l'expression ci-dessus correspond à un développement limité de l'énergie projetée dans l'espace variationnel des Ψ par rapport aux degrés de liberté caractéristiques de la symétrie, les fluctuations ΔN . A l'aide de la méthode de Kamlah, il est possible d'obtenir une nouvelle fonctionnelle de l'état intrinsèque correspondant à l'énergie projetée ci-dessus dont le développement a été tronqué à un ordre K donnée par

$$E^N \approx \sum_n^K h_n \langle \Psi | (\Delta N)^n | \Psi \rangle. \quad (5.32)$$

On peut alors rechercher le minimum de la fonctionnelle définie ci-dessus, par exemple en gardant le développement jusqu'à l'ordre 2. Alors, l'expression du coefficient est donnée par

$$h_2 = \frac{\langle \hat{H}(\Delta N)^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle \langle (\Delta N)^2 \rangle - \frac{\langle \hat{H} \Delta N \rangle \langle (\Delta N)^3 \rangle}{\langle (\Delta N)^2 \rangle}}{\langle (\Delta N)^4 \rangle - \langle (\Delta N)^2 \rangle^2 - \frac{\langle (\Delta N)^3 \rangle^2}{\langle (\Delta N)^2 \rangle}}. \quad (5.33)$$

On voit dans cette expression que ces coefficients sont eux-mêmes des fonctionnelles de l'état intrinsèque. Il existe deux niveaux pour résoudre la recherche de minimum. La première dans la philosophie de l'approche de Kamlah, est de procéder à une minimisation de l'énergie projetée E^N en prenant en compte les variations de h_2 par rapport aux degrés de liberté de l'état Ψ . Dans la seconde, qui correspond à la méthode de Lipkin-Nogami (LN), la valeur de h_2 est gardée fixée lors de la minimisation.

Cette dernière est la méthode la plus employée, elle est bien plus simple et donne d'un point de vue pratique des résultats parfois meilleurs[90, 123]. Cela vient du fait qu'elle balaye un espace variationnel plus restreint où le développement au second ordre reste valable. Ainsi, dans la méthode de Kamlah, les variations sont faites dans un espace beaucoup plus large et il peut arriver que le développement de l'énergie à un ordre fini ne soit plus valable. Cela peut conduire à des énergies bien moins bonnes que la méthode LN. Ceci est illustré dans la figure 5.3 qui présente les méthodes de Kamlah et de LN, dans le cas de l'Hamiltonien de Richardson pour un spectre d'énergie à un corps d'écartement constant $\Delta\epsilon$ en fonction de la force d'appariement $g/\Delta\epsilon$.

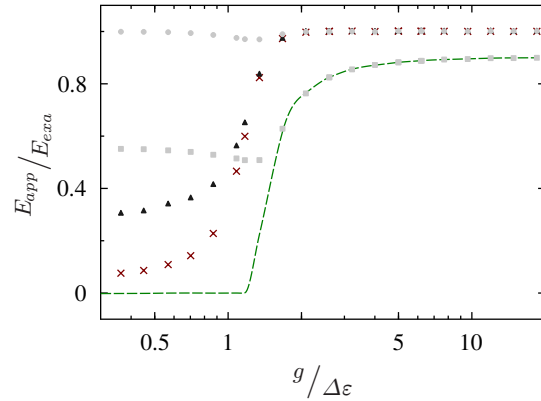


FIG. 5.3: Le rapport entre l'énergie calculée avec les méthodes approchées BCS (ligne verte en pointillé), LN à l'ordre deux (croix marron) et les ordres 1 (triangles noirs), 2 (carrés gris) et 6 (cercles gris clair) de la méthode de Kamlah et l'énergie exacte d'un modèle de pairing à deux niveaux est tracé pour différentes valeurs de la constante de pairing. Le nombre de particules est fixé à 10. Figure extraite de la référence [123].

Dans cette figure, les rapports entre l'énergie exacte et les énergies prédites par une méthode approchée telles que BCS (ligne pointillée verte), LN (croix marron) et les ordres 1 (triangles noirs), 2 (carrés gris) et 6 (cercles gris clair) de la méthode de Kamlah, sont tracés. Pour des couplages g plus grand que l'espacement $\Delta\varepsilon$ des énergies à un corps, la fonctionnelle associée à LN est meilleure que celle obtenue à partir du développement de Kamlah. Toutefois lorsque des ordres supérieurs sont inclus, Kamlah donne de très bon résultats.

L'énergie LN appartient[90] au second type de méthodes permettant la minimisation partielle de l'énergie projetée. Dans ces approches, on propose d'identifier les degrés de liberté "collectifs", d'intérêt dans le cas de la symétrie qu'on souhaite restaurer, par exemple dans le cas de LN à l'ordre deux présenté ci-dessus, c'est le second ordre des fluctuations du nombre de particules(ΔN^2) qui est utilisé.

En rajoutant un multiplicateur de Lagrange à l'énergie intrinsèque, il est possible de minimiser l'énergie projetée par rapport à $(\Delta N)^2$ et à l'état intrinsèque pour obtenir une approximation du minimum VAP. Ce procédé est appelé RVAP (pour "Restricted VAP") en référence à la variation après la projection. En physique nucléaire, on combine généralement cette méthode avec la PAV, ce qui permet d'obtenir avec une très bonne approximation l'état projeté associé à la solution VAP. La figure 5.4 présente le résultat

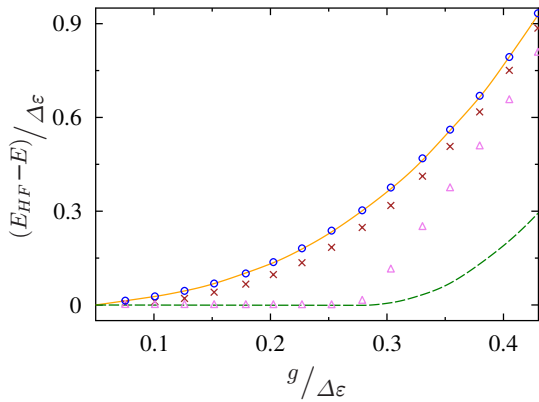


FIG. 5.4: Comparaison de l'énergie de corrélation du modèle de l'Hamiltonien de pairing en fonction de la force de l'interaction d'appariement $g/\Delta\varepsilon$ entre différentes méthodes de projection, la RVAP appliquée aux fluctuations $(\Delta N)^2$ et $(\Delta N)^4$ (ligne continue jaune), LN à l'ordre deux (croix marron), BCS projeté après la variation (triangles violets) et avant la variation (cercles bleus). L'énergie BCS (ligne pointillée verte) est tracée à titre de référence. Le nombre de particules est fixé à 10. Figure extraite de la référence [90].

des différentes méthodes appliquées à l'Hamiltonien de Richardson dans le cas d'un spectre d'énergie à un corps d'écartement constant $\Delta\varepsilon$ en fonction de la force d'appariement $g/\Delta\varepsilon$. Dans cette figure, l'énergie de corrélation est définie ici par la différence entre l'énergie obtenue par une des méthodes correctives et l'énergie Hartree-Fock. La solution BCS (ligne pointillée verte) et celle obtenue avec LN à l'ordre deux (croix marron) sont tracées. Sont présentées également sur cette figure, les méthodes VAP (cercles bleus) qui se juxtapose avec la solution exacte et nous sert ainsi de référence, la méthode LN suivie de la PAV et la méthode RVAP sur les degrés de liberté $(\Delta N)^2$ et $(\Delta N)^4$ (ligne continue jaune).

On retrouve l'effet de seuil de la théorie BCS lorsque la force de l'appariement est trop faible ($g/\Delta\varepsilon \rightarrow 0$) et on voit que la méthode LN, corrige ce défaut tout en améliorant la reproduction de l'énergie exacte (VAP de référence). On voit aussi que les méthodes LN+PAV et RVAP sont de très bonnes approximations de l'énergie de référence VAP.

Ces différentes approches ont été introduites en partant d'un état BCS, or nous avons vu précédemment que dans ce cas, l'énergie peut être interprétée comme une fonctionnelle des nombres d'occupation. De manière générale, toutes les quantités $(\Delta N)^2, (\Delta N)^4, \dots$ entrant dans les corrections apportées à l'énergie BCS peuvent également être écrites comme des fonctionnelles des probabilités d'occupation n_i et des orbitales associées ψ_i . Ceci peut être montré simplement en considérant le théorème de Wick et le fait que les densités normales et anormales sont, dans le cas d'un vide de qp de type BCS, des fonctions des n_i . Ainsi, les méthodes BCS+LN, BCS+Kamlah, BCS+RAP et BCS+LN+PAV peuvent être vu comme des approches permettant d'obtenir des fonctionnelles DMFT enrichies par rapport à la seule énergie BCS. Par exemple dans la référence [123], des formes explicites de ces fonctionnelles sont données.

5.3 Proposition d'une nouvelle fonctionnelle pour décrire l'appariement

Dans les discussion précédentes, nous avons vu que partant d'une théorie BCS interprétée en terme de fonctionnelle, il était possible d'enrichir le contenu physique des dépendances en n_i en cherchant à reproduire les corrélations associées à la conservation du nombre de particules. Pour cela nous avons proposé deux philosophies, la première consiste à généraliser la relation BCS (5.14) telle que les praticiens de la DMFT en matière condensée, et la seconde consiste à identifier une fonctionnelle à partir de méthodes approchées utilisées dans le cas Hamiltonien pour restaurer partiellement la symétrie de jauge. Le constat qu'on peut faire à propos de ces dernières, est que les dépendances fonctionnelles sont très compliquées (Eq. 5.33), mais aussi qu'il est difficile partant d'une généralisation de l'expression de l'énergie BCS de trouver une paramétrisation adaptée à reproduire la solution exacte du modèle de l'appariement. C'est pourquoi nous proposons d'utiliser l'équation permettant de construire les états BCS (5.13) en imposant directement la conservation du nombre de particules ce qui s'écrit

$$|\Psi^N\rangle = |\Psi^N(i)\rangle + x_i a_i^\dagger a_i^\dagger |\Psi^{N-1}(i)\rangle. \quad (5.34)$$

L'état Ψ^N correspond alors à l'état PBCS ("Projected BCS"). Or le chapitre 4 a montré que la théorie BCS ou HFB projetée dans sa variante VAP, donne de très bons résultats mais reste difficile à appliquer dans les noyaux. Dans la suite de ce chapitre, nous allons voir si une théorie fonctionnelle de la matrice densité à un corps de l'état projeté peut être obtenue en partant directement d'un état PBCS.

Position du problème :

L'état PBCS s'obtient à partir d'un vide de quasi-particules écrit dans la base canonique de $\hat{\rho}^1$ projeté sur l'espace de Fock de $2N$ particules, c'est-à-dire

$$|\Psi^N\rangle = P^N \prod_{i>0} (1 + x_i a_i^\dagger a_i^\dagger) |-\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N}^{\neq} x_{i_1} \cdots x_{i_N} a_{i_1}^\dagger a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_N}^\dagger a_{i_N}^\dagger |-\rangle. \quad (5.35)$$

Les propriétés de ces états ont été discutées en détail dans la section 4.2.1. A partir de ces dernières, il est possible d'écrire de manière explicite les composantes des matrices densités à un, deux ... N-corps de l'état projeté en fonction des x_i^2 , les degrés de libertés intrinsèque de cette classe d'états. A titre de comparaison, les formes des éléments des matrices densités à un et deux corps sont données ci-dessous dans le cas de BCS et de PBCS :

BCS	PBCS
$n_i = \frac{x_i^2}{1 + x_i^2}$	$n_i^N = x_i^2 N \frac{\sum_{i_1, \dots, i_N \neq i}^{\neq} x_{i_1}^2 \cdots x_{i_N}^2}{\sum_{i_1, \dots, i_N}^{\neq} x_{i_1}^2 \cdots x_{i_N}^2 \neq i}$
$\rho_{jiji}^2 = \frac{x_i^2 x_j^2}{(1 + x_i^2)(1 + x_j^2)}$	$\rho_{jiji}^{2[N]} = x_i^2 x_j^2 N(N-1) \frac{\sum_{i_1, \dots, i_N \neq ij}^{\neq} x_{i_1}^2 \cdots x_{i_N}^2}{\sum_{i_1, \dots, i_N}^{\neq} x_{i_1}^2 \cdots x_{i_N}^2} \quad (5.36)$
$\rho_{jjii}^2 = \frac{x_i x_j}{(1 + x_i^2)(1 + x_j^2)}$	$\rho_{jjii}^{2[N]} = x_i x_j N \frac{\sum_{i_1, \dots, i_N \neq ij}^{\neq} x_{i_1}^2 \cdots x_{i_N}^2}{\sum_{i_1, \dots, i_N}^{\neq} x_{i_1}^2 \cdots x_{i_N}^2}$

On voit que dans le cas BCS, il existe une relation simple entre les x_i^2 et les n_i . Ainsi, les éléments des matrices densités de la théorie BCS peuvent s'exprimer aisément en fonction des n_i , par exemple

$$\rho_{jjii}^2 = \sqrt{n_i(1 - n_i)} \sqrt{n_j(1 - n_j)}. \quad (5.37)$$

On voit que dans le cas de l'état PBCS, l'expression est beaucoup plus complexe. C'est pourquoi ces états sont plus compliqués à utiliser. Afin d'obtenir une fonctionnelle DMFT, il est donc nécessaire d'inverser la relation du tableau ci-dessus, qui relie les n_i^N aux x_i^2 . A partir des expressions données, on peut anticiper que ce n'est pas évident. Toutefois, ci-dessous, l'existence de cette dernière est montrée et nous proposons une forme explicite approchée.

Les x_i^2 comme fonctionnelle implicite des n_i^N :

Dans la section 4.2.1, nous avons présenté des propriétés que vérifie l'état PBCS. Ici, elles vont être utilisées pour connaître plus précisément les relations reliant les x_i^2 et les n_i^N entre eux. Notre point de départ est l'expression des probabilités d'occupation de l'état projeté

$$n_i^N = x_i^2 N \frac{I^{N-1}(i)}{I^N}. \quad (5.38)$$

En utilisant la propriété Eq. (4.18), on obtient que

$$n_i^N = x_i^2 \sum_{j \neq i} x_j^2 N \frac{I^{N-2}(i, j)}{I^N}, \quad (5.39)$$

qui donne, en utilisant l'expression de la densité à deux corps de l'Eq. (4.24),

$$n_i^N (N - 1) = \sum_{j \neq i} \frac{n_i^N x_j^2 - x_i^2 n_j^N}{x_i^2 - x_j^2}. \quad (5.40)$$

Finalement, cette équation se réécrit

$$N(1 - n_i^N) = \sum_{j \neq i} (n_j^N - n_i^N) \frac{x_j^2}{x_j^2 - x_i^2}. \quad (5.41)$$

Cela montre que pour chaque état i , il existe une relation particulière entre sa probabilité d'occupation n_i^N et x_i^2 , un des degrés de liberté de Ψ^N . Ces équations peuvent être résolues graphiquement, pour un jeu de x_i^2 , on peut trouver les n_i^N correspondants. Réciproquement, pour un jeu de n_i^N , on peut trouver les x_i^2 correspondants. Ainsi, les x_i^2 peuvent effectivement être considérés comme des fonctionnelles au moins implicites des probabilités d'occupation. Cette équation séculaire est illustrée graphiquement dans la figure 5.5, dans le cas du Hamiltonien de Richardson où l'interaction d'appariement est constante et le spectre des états à un corps est fixe d'écart constant $\Delta\varepsilon$, avec comme paramètres supplémentaires, 16 particules ($N = 8$) et une constante de couplage $g/\Delta\varepsilon = 0.22$. La ligne continue correspond au membre de droite de l'équation ci-dessus divisé par $(1 - n_i^N)$ en faisant varier x_5^2 alors que les autres x_i^2 et n_i^N sont gardés constants. Les lignes verticales correspondent à la valeur des x_i^2 au minimum de l'énergie. La ligne horizontale correspond à $N = 8$. L'équation (5.41) est vérifiée lorsque la ligne pointillée croise la ligne solide, on voit que c'est le cas pour la valeur de x_5^2 correspondant au minimum de l'énergie, mis en évidence par le carré noir. Il est à noter que la ligne horizontale croise plusieurs fois la ligne continue. Toutefois, le carré noir est le seul cas où toutes les équations sont vérifiées simultanément.

Dans la théorie BCS, il est possible d'inverser les relations qui relient les x_i^2 avec les n_i . Par exemple, à partir des Eqs. (5.36) on peut écrire que

$$\begin{cases} n_i = \frac{x_i^2}{1 + x_i^2}, \\ x_i^2 = \frac{n_i}{1 - n_i}. \end{cases} \quad \text{BCS} \quad (5.42)$$

Pour pouvoir écrire l'énergie associée à l'état PBCS sous la forme d'une fonctionnelle de la DMFT, nous devons faire de même en inversant la relation entre les n_i^N et les x_i^2 à partir des équations (5.36). Dans le cas de l'état PBCS l'inversion est plus difficile, en partant de l'expression de n_i

$$n_i^N I^N = x_i^2 N I^{N-1}(i), \quad (5.43)$$

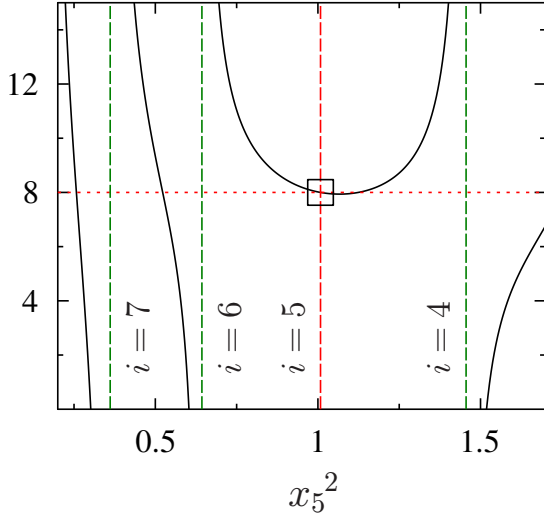


FIG. 5.5: Illustration graphique de l'Eq. (5.41) dans le cas du Hamiltonien de pairing pour 16 particules ($N = 8$) et une constante de couplage $g/\Delta\epsilon = 0.22$. La ligne continue correspond au membre de droite de l'Eq. (5.41) divisé par $(1 - n_i^N)$ en faisant varier x_5^2 alors que les autres x_i^2 et n_i^N sont gardés constants. Les lignes verticales correspondent à la valeur des x_i^2 au minimum de l'énergie. La ligne horizontale correspond à $N = 8$. L'équation (5.41) est vérifiée lorsque la ligne pointillée croise la ligne solide, on voit que c'est le cas pour la valeur de x_5^2 correspondant au minimum, mis en évidence par le carré noir.

et en utilisant la relation de récurrence (4.16), on obtient

$$n_i^N I^N(i) + x_i^2 N n_i^N I^{N-1}(i) = x_i^2 N I^{N-1}(i). \quad (5.44)$$

En posant

$$\alpha_N(i) = \frac{I^N(i)}{N I^{N-1}(i)}, \quad (5.45)$$

on trouve que

$$\begin{cases} n_i^N = \frac{x_i^2}{\alpha_N(i) + x_i^2}, \\ x_i^2 = \alpha_N(i) \frac{n_i^N}{1 - n_i^N}. \end{cases} \quad \text{PBCS} \quad (5.46)$$

On voit en particulier que si $\alpha_N(i) = 1$, la limite BCS est retrouvée. Donc, l'effet de la restauration du nombre de particules à partir d'un vide de quasi-particules de type BCS est donné par la déviation de $\alpha_N(i)$ par rapport à 1.

Il est intéressant de noter que l'équation ci-dessus peut être dérivée d'une manière alternative. En effet, il est possible de caractériser la dépendance des x_i^2 en fonction de n_i^N à l'aide de l'équation différentielle suivante, obtenue à partir de l'Eq. (5.43)

$$\frac{\partial x_i^2}{\partial n_i^N} = \frac{x_i^2}{n_i^N(1 - n_i^N)}, \quad (5.47)$$

dont la solution correspond à

$$x_i^2 = \alpha_N(i) \frac{n_i^N}{1 - n_i^N}. \quad (5.48)$$

Il est également possible d'obtenir l'équation différentielle correspondante à la dépendance des x_i^2 en fonction des n_j^N avec $j \neq i$ à l'aide des propriétés (4.22) et (4.24) des états PBCS, on a alors

$$\frac{\partial x_i^2}{\partial n_j^N} = \frac{x_j^2(x_j^2 - x_i^2)}{n_i^N x_j^2(1 + n_j^N) - n_j^N x_i^2(1 + n_i^N)} . \quad (5.49)$$

On voit que cette dépendance est très compliquée et qu'elle correspond aux effets de taille finie qui apparaissent lorsque $\alpha_N(i) \neq 1$. C'est pourquoi, ci-dessous, une approche perturbative dont l'ordre zéro est BCS, est proposée pour incorporer ces dépendances de façon approchée.

Fonctionnelle explicite : développement en $1/N$:

Afin de pouvoir exprimer l'ensemble des degrés de liberté de l'état PBCS en fonction des nombres d'occupation, ce qui permettrait d'obtenir une fonctionnelle de la matrice densité à un corps de l'état projeté, on se propose de trouver une valeur approchée de $\alpha_N(i)$ en corrigeant sa dépendance fonctionnelle par rapport aux n_i^N à partir de la limite BCS. Cette dernière correspond au cas où on a $\alpha_N(i) = 1$. Remarquons tout d'abord, que nous pouvons généraliser les coefficients α_N à partir des recouvrements de la classe d'états définit dans l'Eq. (4.14), alors

$$\alpha_K(i_1, \dots, i_k) = \frac{I^K(i_1, \dots, i_k)}{(K-1) I^{K-1}(i_1, \dots, i_k)} . \quad (5.50)$$

En utilisant la propriété (4.18) des $I^N, I^{N-1}(i), \dots$, nous pouvons écrire que

$$\alpha_N(i) = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} x_j^2 \frac{I^{N-1}(i, j)}{I^{N-1}(i, j) + x_j^2 (N-1) I^{N-1}(i, j)} , \quad (5.51)$$

ce qui nous permet finalement d'identifier

$$\alpha_N(i) = \frac{1}{N} \sum_{j \neq i} x_j^2 \frac{\alpha_{N-1}(i, j)}{x_j^2 + \alpha_{N-1}(i, j)} , \quad (5.52)$$

Cette équation permet de relier les $\alpha_N(i)$ aux $\alpha_{N-1}(i, j)$. De manière générale, les coefficients $\alpha_K(i_1, \dots, i_k)$ peuvent être reliés aux coefficients $\alpha_{K-1}(i_1, \dots, i_k, j)$ par la relation

$$\alpha_K(i_1, \dots, i_k) = \frac{1}{K} \sum_{j \neq (i_1, \dots, i_k)} x_j^2 \frac{\alpha_{K-1}(i_1, \dots, i_k, j)}{x_j^2 + \alpha_{K-1}(i_1, \dots, i_k, j)} . \quad (5.53)$$

Supposons pour l'instant la limite BCS pour les coefficients α_K , avec $K < N$. Par exemple, prenons $\alpha_{N-1}(i, j) = 1$ en repartant de l'équation (5.52) nous pouvons alors identifier que

$$\alpha_N(i) \simeq \frac{1}{N} \sum_{j \neq i} \frac{x_j^2}{x_j^2 + 1} \simeq \frac{1}{N} \sum_{j \neq i} n_j^N = 1 - \frac{1}{N} n_i^N . \quad (5.54)$$

ce qui correspond au premier ordre de la correction en $1/N$ à l'approximation BCS, et nous permet (dans cette limite) d'obtenir une expression améliorée de la dépendance fonctionnelle de $\alpha_N(i)$ par rapport aux nombres d'occupation de l'état PBCS. Nous pouvons alors itérer l'idée ci-dessus pour obtenir successivement les relations suivantes

$$\begin{aligned}\alpha_{N-1}(i, j) &\simeq \frac{1}{N-1} (N - n_i^N - n_j^N), \\ \alpha_{N-2}(i, j, k) &\simeq \frac{1}{N-2} (N - n_i^N - n_j^N - n_k^N), \\ &\dots\end{aligned}\tag{5.55}$$

Ainsi, si on reporte $\alpha_N(i, j)$ dans $\alpha_N(i)$, on obtient un développement limité à l'ordre $1/N(N-1)$ de l'expression fonctionnelle de ce dernier. Il est possible d'utiliser la méthode ci-dessus pour inclure systématiquement les corrections d'ordre supérieur dans l'expression de $\alpha_N(i)$. Pour en obtenir des formes simples, les ordres supérieurs provenant du développement limité de $\alpha_K(i, \dots)/(x_i^2 + \alpha_K(i, \dots))$ ont été négligés. Il a toutefois été testé numériquement que cette approximation est valide. En faisant ceci, on obtient une expression systématique de $\alpha_N(i)$ au-delà de sa forme donnée par la théorie BCS. Ainsi, on a

$$\begin{aligned}\alpha_N(i) &= 1 - \frac{1}{N} n_i^N + \frac{1}{N(N-1)} \sum_{j \neq i} (n_j^N)^2 [1 - (n_i^N + n_j^N)] \\ &\quad + \frac{1}{N(N-1)(N-2)} \sum_{(k,j) \neq i}^{\neq} (n_j^N)^2 (n_k^N)^2 [2 - (n_i^N + n_j^N + n_k^N)] + \dots\end{aligned}\tag{5.56}$$

qui permet d'obtenir une forme fonctionnelle approchée de la dépendance de $\alpha_N(i)$ en fonction des n_i^N à un ordre donné. Nous pouvons alors utiliser l'approximation de $\alpha_N(i)$ ci-dessus pour réécrire l'énergie associée à un vide de quasi-particules de type BCS, projeté sur l'espace de Fock de N particules, comme une fonctionnelle de la matrice densité à un corps.

Par exemple, dans le cas de l'Hamiltonien de Richardson, une expression de l'énergie en fonction des x_i^N et n_i^N est donnée à l'aide des Eqs. (4.22) et (4.24) par

$$\frac{\langle \Psi^N | \hat{H} | \Psi^N \rangle}{\langle \Psi^N | \Psi^N \rangle} = \sum_i \varepsilon_i n_i^N + g \sum_{ij} \frac{x_j^2 n_i^N - n_j^N x_i^2}{x_i^2 - x_j^2}.\tag{5.57}$$

A l'aide de l'expression des probabilités d'occupation n_i^N en fonction de $\alpha_N(i)$, nous pouvons écrire la fonctionnelle suivante pour décrire l'énergie du modèle de Richardson

$$\mathcal{E}[n_i^N] = \sum_i \varepsilon_i n_i^N + g \sum_{ij} (n_i^N - n_j^N) \frac{\sqrt{\alpha_N(i)\alpha_N(j)} \sqrt{n_i^N(1-n_i^N)} \sqrt{n_j^N(1-n_j^N)}}{n_i^N(1-n_j^N)\alpha_N(i) - n_j^N(1-n_i^N)\alpha_N(j)},\tag{5.58}$$

dont la limite BCS est identifiable lorsque $\alpha_N(i) \rightarrow 1$. En utilisant l'expression (5.56), on obtient une forme explicite de l'énergie en fonction des n_i^N .

Application numérique :

Comme pour le gaz d'électrons homogène en matière condensée, ce modèle pour l'appariement va nous permettre de tester le principe de la fonctionnelle définie par les Eqs. (4.22), (4.24) et l'expression que nous proposons des $\alpha_N(i)$. Une illustration du résultat des corrections successives par rapport à la théorie BCS est présentée dans la figure 5.6. Les énergies de corrélation qui sont présentées sur cette figure, ont été obtenues avec la forme fonctionnelle de l'énergie (Eq. 5.58) où on a utilisé les approximation proposées ci-dessus à un ordre donné. Pour calculer numériquement la solution minimisant l'énergie, nous avons utilisé une méthode de programmation quadratique permettant de la tester avec jusqu'à 400 particules. La minimisation est directement appliquée à l'énergie par rapport aux variations des probabilités d'occupation n_i^N avec les contraintes $0 \leq n_i^N \leq 1$ et $\sum_i n_i^N = N$. Une discussion sur la solution exacte donnée par Richardson[13, 95] est proposée dans le chapitre 6.

Dans la figure ci-dessus, la différence entre l'énergie de corrélation exacte de Richardson (ligne continue rouge) sert de point de départ pour tester les approximations successives dérivées à partir de l'expression (5.56) pour 8 paires. Les courbes ont été obtenues en utilisant la méthode de résolution de Richardson développée dans la référence[96, 103, 104]. Les lignes pointillé long, pointillé court, pointillé long et court et les cercles rouges correspondent respectivement aux énergies obtenues avec la théorie BCS, le premier, deuxième et troisième ordre de l'approximation de $\alpha_N(i)$. On voit sur ces figures que les corrections apportées par rapport à la théorie BCS améliorent la description de l'énergie du système et plus on augmente l'ordre du développement de α_N , plus on se rapproche de la solution exacte, notamment à fort couplage. Par contre, pour reproduire l'énergie de corrélation à faible couplage, il est nécessaire de prendre en compte un grand nombre de termes correctifs, par exemple dans l'encadré de la figure, on peut voir qu'il est nécessaire d'aller au-delà du troisième ordre. Cela est la raison de l'inadéquation de la fonctionnelle BCS proche de

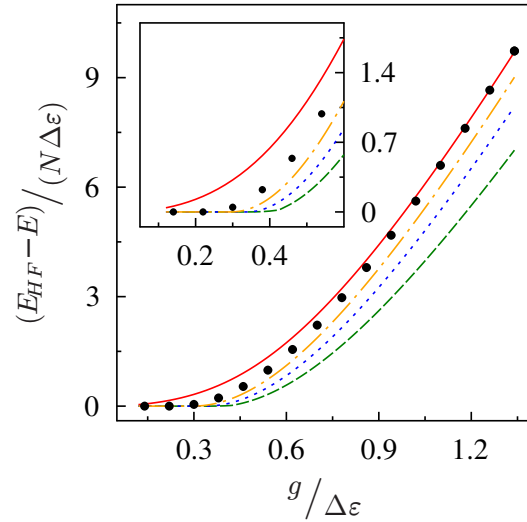


FIG. 5.6: Différence entre l'énergie prédite par la théorie Hartree-Fock E_{HF} et la solution exacte de Richardson (ligne continue rouge), qu'on appelle aussi énergie de corrélation pour 8 paires. Les lignes pointillé long, pointillé court, pointillé long et court et les cercles rouges correspondent respectivement aux énergies obtenues avec la théorie BCS, le premier, deuxième et troisième ordre de l'approximation de $\alpha_N(i)$. Dans l'encadré, un zoom sur la région de faible couplage est présenté.

la limite HF. Le phénomène de seuil à faible couplage révèle que BCS est un très mauvais point de départ dans cette limite. Ainsi, il faudra aller à des ordres très grands en perturbation. La méthode que nous proposons ici pour obtenir une fonctionnelle adaptée pour l'ensemble des paramètres et en particulier pour décrire l'appariement lorsque la force d'appariement est faible, est compliquée à mettre en œuvre notamment lorsqu'il est nécessaire d'inclure un grand nombre de corrections pour décrire avec une bonne précision les effets de taille finie.

Limite Hartree-Fock :

Une des motivations de ce travail est de pouvoir avoir une description de l'appariement valide lorsque l'interaction d'appariement est faible, c'est-à-dire proche de la limite Hartree-Fock où $x_i^2 \rightarrow \infty$ ou 0. Dans cette limite, la prise en compte des premiers ordres du développement en $1/N$ à partir de la solution BCS, ne permet pas une description satisfaisante comme nous venons de voir sur la figure 5.6. Supposons que l'état i est occupé avec $n_i^N \rightarrow 1$, on peut alors donner l'expression des termes correctifs

$$\begin{aligned} \sum_{j \neq i} (n_j^N)^2 [1 - (n_i^N + n_j^N)] &\longrightarrow -(N-1), \\ \sum_{k \neq i}^{\neq} (n_j^N)^2 (n_k^N)^2 [2 - (n_i^N + n_j^N + n_k^N)] &\longrightarrow -(N-1)(N-2), \\ &\dots \end{aligned} \quad (5.59)$$

Repartant dans l'Eq. (5.56), on voit que tous les ordres de la correction contribuent uniformément à l'expression de $\alpha_N(i)$, d'où son caractère non perturbatif dans cette limite. Resommant tous les termes, on obtient finalement que

$$\alpha_N(i) = 1 - n_i^N, \quad (5.60)$$

ainsi on a directement $x_i^2 = n_i^N$. Dans la limite de très faible couplage, on trouve alors que l'énergie s'écrit comme la fonctionnelle suivante

$$\mathcal{E}[n_i^N] = \sum_i \varepsilon_i n_i^N + g \sum_{ij} \sqrt{n_i^N n_j^N}, \quad (5.61)$$

qui permet de décrire les corrélations proches de la limite Hartree-Fock. Cette forme fonctionnelle a également été obtenue dans la référence [110] en utilisant des arguments complètement différents.

Forme compacte d'une fonctionnelle resommée :

Afin d'obtenir une forme fonctionnelle compacte par rapport aux nombres d'occupation et valide à faible couplage, il est nécessaire de resommer les contributions à tous les ordres. Dans le but d'obtenir

une expression formelle simple, l'approximation suivante

$$\begin{aligned} \frac{1}{N(N-1)} \sum_{j \neq i} &\longrightarrow \frac{1}{N^2} \sum_j \dots, \\ \frac{1}{N(N-1)(N-2)} \sum_{k, j \neq i}^{\neq} &\longrightarrow \frac{1}{N^3} \sum_{jk} \dots \\ &\dots \end{aligned} \quad (5.62)$$

peut être faite tout en gardant tous les termes du développement limité. Ce qui nous donne à partir de Eq. (5.56)

$$\begin{aligned} \alpha_N(i) = & 1 - \frac{1}{N} n_i^N + \frac{1}{N^2} \sum_j (n_j^N)^2 [1 - (n_i^N + n_j^N)] \\ & + \frac{1}{N^3} \sum_{kj} (n_j^N)^2 (n_k^N)^2 [2 - (n_i^N + n_j^N + n_k^N)] + \dots \end{aligned} \quad (5.63)$$

où on reconnaît une fraction rationnelle. On voit que $\alpha_N(i)$ peut se mettre sous une forme compacte :

$$\alpha_N(i) = a_0 - a_1 n_i^N, \quad (5.64)$$

où les coefficients a_0 et a_1 sont donnés par

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{N} \left(1 + s_2 + s_2^2 + \dots + s_2^{N-1} \right), \\ &= \frac{1}{N} \frac{1 - s_2^N}{1 - s_2}, \end{aligned} \quad (5.65)$$

et

$$\begin{aligned} a_0 &= 1 + \frac{(s_2 - s_3)}{N} \left(1 + 2s_2 + \dots + (N-1) s_2^{N-2} \right), \\ &= 1 + (s_2 - s_3) \frac{\partial a_1}{\partial s_2}, \end{aligned} \quad (5.66)$$

où les moments s_p sont définis par $s_p = \frac{1}{N} \sum_i (n_i^N)^p$. L'énergie fonctionnelle s'exprime alors par

$$\mathcal{E}[n_i^N] = \sum_i \varepsilon_i n_i^N + g \sum_{ij} \sqrt{n_i^N (1 - n_i^N)} \sqrt{n_j^N (1 - n_j^N)} \frac{\sqrt{(a_0 - a_1 n_i^N)(a_0 - a_1 n_j^N)}}{a_0 - a_1 (n_i^N + n_j^N - n_i^N n_j^N)}. \quad (5.67)$$

Nous avons donc obtenu une fonctionnelle qui comparativement avec sa forme de départ (Eq. 5.57), est complètement réécrite avec des dépendances en n_i^N . Cette fonctionnelle possède les limites que nous souhaitons voir incluses dans la description de l'appariement :

- En effet, l'avantage de la resommation est de réunir dans une unique fonctionnelle les corrélations proches de Hartree-Fock et celles des états BCS :

On peut retrouver le premier cas en posant $n_i^N = 1$ ou 0 ainsi $s_p = 1$ pour tous les $p > 0$, finalement on remarque que $a_0 = a_1 = 1$ alors on retrouve

$$\rho_{jj\bar{i}}^{2[N]} = \sqrt{n_i^N n_j^N}, \quad (5.68)$$

qui correspond aux corrélations proche de HF identifiées plus haut et dans la référence [110].

- Dans la limite thermodynamique obtenue en posant $N \rightarrow \infty$, on identifie que $a_1 = 0$ et $a_0 = 1$, alors on retrouve les corrélations BCS

$$\rho_{jj\bar{i}}^{2[N]} = \sqrt{n_i^N (1 - n_i^N) n_j^N (1 - n_j^N)}. \quad (5.69)$$

- La transition entre ces deux limites se fera à travers la dépendance des paramètres a_0 et a_1 en fonction des n_i^N .

Les figures 5.7 et 5.8 présentent les quantités à tester pour valider une fonctionnelle DMFT. Sur la figure

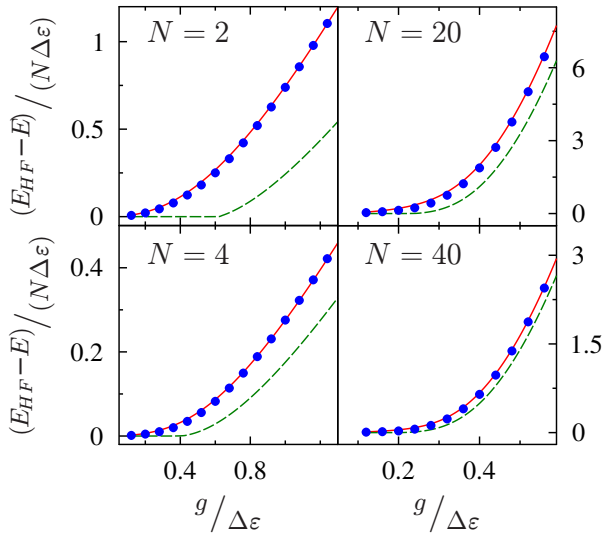


FIG. 5.7: Comparaison entre l'énergie de corrélation, normalisées par $N \Delta \varepsilon$, exacte (ligne continue rouge), BCS (ligne pointillée long verte) et le résultat obtenu par la minimisation de la fonctionnelle de la matrice densité (cercles pleins bleus) à partir de l'approximation (5.64), pour différents nombres de paires, en fonction de la force d'appariement $g / \Delta \varepsilon$.

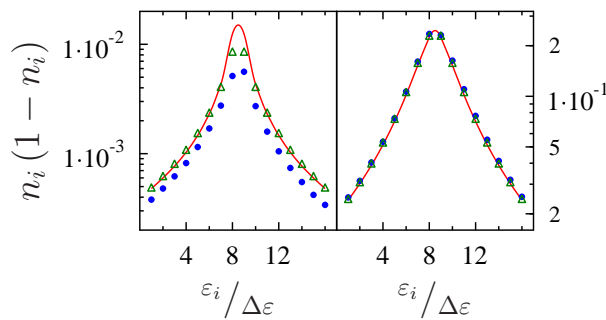


FIG. 5.8: Évolution des $n_i^N (1 - n_i^N)$ en fonction des énergies à un corps ε_i normalisées par leur espacement moyen $\Delta \varepsilon$ pour la solution exacte (ligne continue rouge), la solution BCS projeté (triangles verts), et la fonctionnelle (cercles pleins bleus) pour 16 particules et une force d'appariement de $g / \Delta \varepsilon = 0.16$ (gauche) et 0.56 (droite).

5.7, l'énergie de corrélation normée par $N\Delta\varepsilon$ est tracée en fonction de la force de l'appariement $g/\Delta\varepsilon$ pour plusieurs nombres de particules (2, 4, 20, 40), elle est obtenue en utilisant la nouvelle fonctionnelle (en VAP) et est comparée avec la solution exacte. Sur la figure 5.8, on vérifie que les valeurs propres de la densité à un corps (les n_i^N) soient correctement reproduits. La quantité $n_i^N(1 - n_i^N)$ est tracée en fonction des énergies à un corps normalisées $\varepsilon_i/\Delta\varepsilon$ pour 16 particules et une force d'appariement de $g/\Delta\varepsilon = 0.16$ (gauche) et 0.56 (droite). Sur les figures 5.7 et 5.8, les résultats obtenus avec la solution exacte (lignes continues rouges) à ceux issus du calcul fonctionnel (cercles pleins bleus) et de la théorie BCS (lignes pointillés long vertes et triangles verts) sont comparés. On voit que la fonctionnelle obtenue à partir de la resommation décrit correctement la limite de faible couplage ($g \ll \Delta\varepsilon$) que ce soit en ce qui concerne l'énergie où la distribution des nombres d'occupation. Ces illustrations montrent que la fonctionnelle proposée ici, suivant un développement à partir de la limite BCS et une resommation des corrections, permet une très bonne description de l'énergie de corrélation associée au phénomène de l'appariement. Dans la suite de ce document, cette nouvelle fonctionnelle est testée dans des cas plus complexes (spectre d'énergie à un corps non équidistant, systèmes impairs etc) et dans le cas réaliste de systèmes nucléaires.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à la théorie de la fonctionnelle de la matrice densité à un corps. Nous avons présenté les travaux récents réalisés en matière condensée dans ce domaine. Ils consistent souvent à généraliser une relation dérivée dans le cas Hamiltonien et à l'appliquer à un modèle simple tel que le gaz d'électrons homogène ce qui permet de la tester et de l'optimiser pour qu'elle décrive les effets physiques recherchés. Nous avons rappelé les travaux de Vautherin qui a introduit cette philosophie en physique nucléaire. Il s'avère que la méthodologie proposée par Vautherin est difficile à appliquer dans le cas où on cherche à améliorer la fonctionnelle BCS, en particulier pour résoudre les problèmes de seuil.

C'est pourquoi dans un deuxième temps, nous nous sommes servis des états BCS projetés pour obtenir une énergie fonctionnelle des composantes à un corps (n_i^N et ψ_i) de cet état. Nous avons montré qu'il était possible d'obtenir une forme explicite, capable de reproduire de manière très précise l'énergie d'un système décrivant le phénomène de l'appariement et ses propriétés à un corps. Il est également important de noter que la méthode utilisée a été d'exprimer la densité à deux corps directement comme une fonctionnelle des n_i^N , ainsi la stratégie utilisée ne dépend pas du Hamiltonien choisi et peut être employée pour décrire les corrélations d'appariement dans le cas d'une interaction à deux corps quelconque. Par exemple, dans la section 5.3, nous pouvons directement utiliser l'expression fonctionnelle de $\rho_{jjii}^{2[N]}$. De manière similaire, il est possible d'exprimer celle de $\rho_{jiji}^{2[N]}$, ce qui nous permet finale-

ment d'obtenir une énergie SC-EDF fonctionnelle des composantes de la matrice densité à un corps. En conséquence, nous avons montré ici explicitement que la théorie SC-EDF rentre réellement dans le cadre des théories DMFT.

Applications de la nouvelle fonctionnelle

Résumé :

La nouvelle fonctionnelle pour l'appariement obtenue à l'aide de l'état BCS projeté est appliquée dans ce chapitre. En suivant la philosophie développée dans la DMFT des systèmes électroniques, nous la testons dans le cadre d'un modèle adapté à l'appariement. L'Hamiltonien de Richardson possède une solution exacte qui nous permet de discuter des approximations et de vérifier la cohérence de la fonctionnelle. Les applications de cette dernière pour des systèmes pairs et impairs, dans la limite d'un grand nombre de particules et dans le cas de spectres d'énergie à un corps quelconques sont présentées. Cette dernière illustration nous permet de conclure que cette fonctionnelle est applicable dans des cas réalistes en physique nucléaire.

Sommaire

6.1	Tests de la nouvelle fonctionnelle dans un cas idéal	127
6.1.1	Modèle de l'Hamiltonien de pairing	127
6.1.2	Discussions supplémentaires des applications au modèle de Richardson avec des niveaux équidistants	129
6.1.2.1	Discussion sur l'approximation linéaire qui conduit à la fonctionnelle DMFT (Eq. (5.64))	130
6.1.2.2	Vérification systématique de la matrice densité à un corps	131
6.1.2.3	Développement limité de la fonctionnelle pour une forme simplifiée	132
6.1.3	Applications	133
6.1.3.1	Les systèmes impairs vs pairs	134
6.1.3.2	Limite d'un grand nombre de particules	135

6.1.3.3	Spectres d'énergies à un corps quelconques	137
6.2	Conclusion	138

6.1 Tests de la nouvelle fonctionnelle dans un cas idéal

La fonctionnelle proposée dans le chapitre précédent a été obtenue à partir d'une approximation permettant de donner une expression de l'énergie en fonction des probabilités d'occupation n_i^N . Cette fonctionnelle rentre dans le cadre de la DMFT où les objets d'intérêt sont l'énergie et ses dépendances associées aux composantes de la matrice densité à un corps $\hat{\rho}^1$. On a vu, en particulier, que au minimum de l'énergie, cette dernière et la densité à un corps sont prédites précisément. Pour construire la fonctionnelle pour l'appariement proposée dans le chapitre 5, nous nous sommes basés sur les états de vide de quasi-particules BCS projetés (PBCS). Ces états qui décrivent un condensat de paires de spins opposés (cf. section 4.2.1), permettent de prendre en compte le phénomène de l'appariement et les effets de taille finie associés à la conservation du nombre de particule. Cette classe d'états, combinée à un principe variationnel, donne une approximation très proche de la solution exacte dans le cas de modèles schématiques tel que l'Hamiltonien de Richardson généralement utilisé pour tester la description de l'appariement (cf. figure 5.5). Certaines des propriétés de cet état permettent de l'interpréter comme un état auxiliaire associé à la DMFT. En particulier, l'état PBCS (i) est naturellement dans la base canonique de $\hat{\rho}^1 [N]$ et (ii) ses degrés de liberté intrinsèque, les $\{x_{i_1}^2, \dots, x_{i_\Omega}^2\}$ sont des fonctionnelles implicites des probabilités d'occupation $\{n_{i_1}^N, \dots, n_{i_\Omega}^N\}$ (cf. chapitre 4). A partir de ce constat, nous avons, dans le chapitre précédent, proposé une approximation de cette relation, nous permettant d'obtenir une fonctionnelle DMFT explicite. Pour pouvoir tester la validité de la fonctionnelle proposée et nous rapprocher des cas réalistes, dans cette section, la théorie DMFT pour l'appariement est appliquée de manière systématique (a) en faisant varier les paramètres du modèle de Richardson qui sera considéré par la suite, (b) pour décrire des systèmes impairs en utilisant la méthode de blocking et (c) dans le cas de spectres d'énergie à un corps quelconques.

6.1.1 Modèle de l'Hamiltonien de pairing

Avant de présenter les applications de la DMFT, les méthodes de résolution et les propriétés de l'Hamiltonien de Richardson sont présentées plus en détails dans cette section. Les travaux de Bohr, Mottelson et Pines[33] ont mis en évidence que l'organisation des nucléons sur un ensemble d'énergie à un corps $\{\varepsilon_i\}$, par exemple celle du modèle en couche nucléaire, pouvait être influencée par des corrélations du type de celles associées à l'effet supraconducteur en matière condensée. Ces corrélations d'appariement sont importantes pour décrire les états proches du niveau de Fermi, en particulier, pour les noyaux dont les nucléons sont sur des couches ouvertes ou proches de la fermeture de couche. Dans ce contexte, le spin des nucléons joue un rôle particulier puisque l'observation laisse penser qu'ils s'associent entre partenaires de spin opposé. C'est pourquoi, le modèle de l'Hamiltonien de Richardson est construit pour décrire une algèbre $\mathfrak{su}(2)$ de spins. Ceci est réalisé à partir d'une combinaison linéaire

des opérateurs suivants

$$\begin{aligned}\hat{n}_i &= a_i^\dagger a_i, \\ d_i^\dagger &= a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger,\end{aligned}\tag{6.1}$$

où

$$\begin{aligned}[\hat{n}_i, d_j^\dagger] &= 2 \delta_{ij} d_j, \\ [\hat{n}_i, d_j] &= -2 \delta_{ij} d_i^\dagger, \\ [d_i^\dagger, d_j] &= -4 \delta_{ij} \hat{n}_i.\end{aligned}\tag{6.2}$$

Dans le cas d'une interaction à deux corps constante dans le canal d'appariement, l'Hamiltonien de Richardson devient

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i - g \sum_{ij} d_i^\dagger d_j, \\ &= \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i - g \sum_{ij} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_j a_{\bar{j}},\end{aligned}\tag{6.3}$$

où les ε_i sont les énergies à un corps et g est la constante qui mesure la force de l'appariement. Ce Hamiltonien peut se généraliser à une interaction quelconque[124–126]. Richardson et Sherman[13, 95] ont montré que la solution exacte qui diagonalise le Hamiltonien ci-dessus correspond à un état donné par

$$|\Psi^N\rangle = \mathcal{C} \prod_{\alpha} \Gamma^\dagger(\alpha) |-\rangle,\tag{6.4}$$

où \mathcal{C} est une constante assurant la normalisation de l'état et $\Gamma^\dagger(\alpha)$ l'opération de création d'une paire correspondant à l'énergie E_α avec la distribution $\{x_i(\alpha)\}$ sur les états à un corps ψ_i et $\psi_{\bar{i}}$, c'est-à-dire

$$\Gamma^\dagger(\alpha) = \sum_i x_i(\alpha) a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger.\tag{6.5}$$

En posant,

$$x_i(\alpha) = \frac{1}{2\varepsilon_i - E_\alpha}.\tag{6.6}$$

Il est possible de montrer que l'état ainsi défini, dit état de Richardson, correspond à un vecteur propre du Hamiltonien (6.3). Celui-ci est associé à la valeur propre E qui s'exprime par $E = \sum_i \varepsilon_i n_i^N + \sum_{\alpha} E_\alpha$ si les énergies de paire E_α vérifient l'ensemble d'équations couplées non linéaires suivantes

$$\frac{1}{g} - \sum_i \frac{1}{2\varepsilon_i - E_\alpha} + \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{1}{E_\alpha - E_\beta} = 0.\tag{6.7}$$

Richardson[96] puis Rombouts, Van Neck et Dukelsky[125] ont proposé des méthodes numériques adaptées à la résolution de cet ensemble d'équations qui permettent en particulier de traiter les problèmes de divergences apparaissant dans les fractions rationnelles ci-dessus. Cette méthode a été utilisée pour obtenir les résultats discutés dans ce chapitre. Nous avons employé le programme développé par Sandulescu et Bertsch[103] pour résoudre les équations séculaires ci-dessus.

Bien que le travail présenté dans ce mémoire se restreint à l'état fondamental, la spectroscopie de ces états est également très intéressante. En effet, il est possible d'identifier que certains types d'états excités associés à ce modèle de l'appariement correspondent à des phénomènes ou à des observations attendues dans la spectroscopie des noyaux. Par exemple dans la référence [124], Dukelsky rappelle que les vibrations de paires sont décrites ici par le second, troisième etc... ensemble de solutions $\{E_\alpha\}$ vérifiant les équations séculaires ci-dessus. De même, les modes associés à la réponse de petite amplitude appliquée à un vide de qp (QRPA) correspondent ici à un état de Richardson Ψ^N où une ou plusieurs paires ont été brisées $\Gamma_\alpha^\dagger \rightarrow a_i^\dagger a_j^\dagger$. Comme nous l'avons discuté dans la section sur l'appariement (section 2.1.2), ce type d'excitation joue un rôle très important dans la spectroscopie de basse énergie en physique nucléaire. Ce modèle est donc très adapté pour tester les phénomènes associés à l'appariement. Dans la suite de ce chapitre, nous allons nous intéresser à vérifier l'applicabilité de la nouvelle fonctionnelle décrivant l'appariement dans le cadre de la DMFT, à ce titre l'Hamiltonien de Richardson sera notre modèle test à l'instar de la matière nucléaire infinie qui permet de déterminer les paramètres des interactions nucléaires effectives.

6.1.2 Discussions supplémentaires des applications au modèle de Richardson avec des niveaux équidistants

Ci-dessous, la précision que nous avons obtenu dans le cas test du chapitre précédent est rappelée. Sauf si mentionné, le spectre des énergies à un corps intervenant dans l'Hamiltonien de Richardson est considéré d'espacement équidistant. Dans la figure 6.1, nous présentons l'énergie de corrélation $E_{HF} - E$ normalisée par l'espacement moyen des énergies à un corps $\Delta\varepsilon$ en fonction de la force de l'appariement $g/\Delta\varepsilon$ pour 16 particules (haut) et 8 particules (bas). A gauche, les méthodes BCS (ligne verte en pointillé long), VAP (cercles bleus) et PAV (triangles violets) et la solution exacte de Richardson (ligne continue rouge) sont comparées au résultat de la fonctionnelle DMFT (cercles pleins bleus) pour l'appariement (Eq. 5.67) tracée à droite. Dans le cadre de la DMFT, nous regardons également le pouvoir prédictif de la DMFT pour décrire les probabilités d'occupation. Ceci est illustré, dans les encadrés, à l'aide de la quantité $n_i^N(1 - n_i^N)$, prédite par les différentes théories et tracée pour $g/\Delta\varepsilon = 0.82$. On voit sur cette figure que la théorie VAP reproduit très bien l'énergie exacte. Cela peut être mis sur le compte de la forme de l'état PBCS qui est très proche de celle de la solution exacte de Richardson (Eq. 6.4). C'est pourquoi, quand il est combiné avec un principe variationnel, il permet d'obtenir une

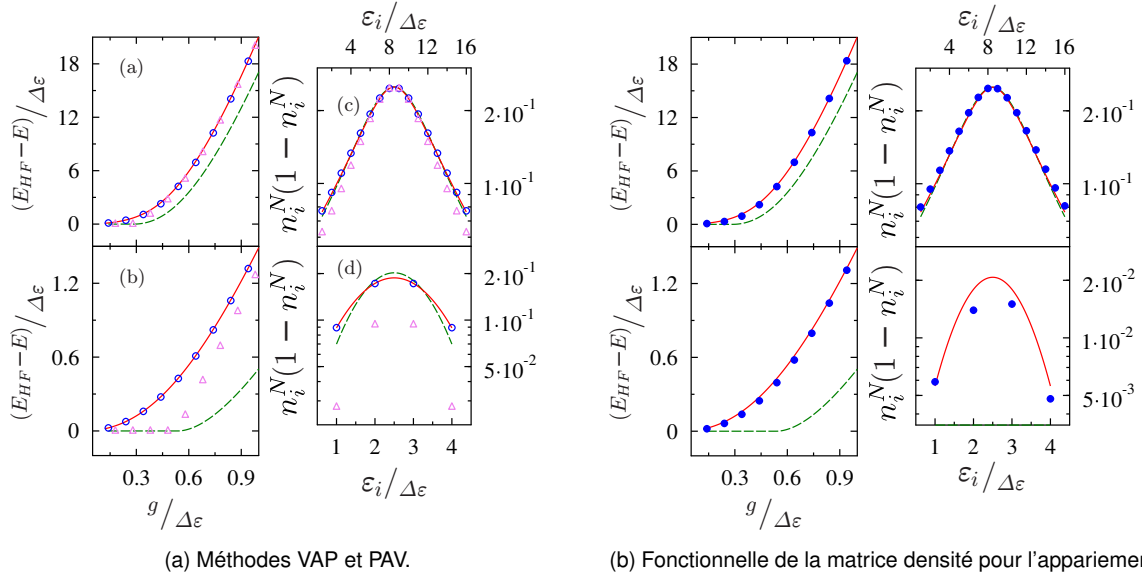


FIG. 6.1: L'énergie de corrélation $E_{HF} - E$ normalisée par l'espace moyen des énergies à un corps $\Delta\epsilon$ obtenue dans le cas de l'Hamiltonien schématisé de pairing est tracée en fonction de la constante d'appariement normalisée $g / \Delta\epsilon$ pour 16 particules (haut) et 8 particules (bas) dans les différentes théories BCS, PAV, VAP, exacte et de la fonctionnelle de la matrice densité proposée dans le chapitre 5. À gauche, les méthodes BCS (ligne verte en pointillé long), VAP (cercles bleus) et PAV (triangles violets) et la solution exacte de Richardson (ligne continue rouge) sont comparées au résultat de la fonctionnelle DMFT (cercles pleins bleus) pour l'appariement (Eq. 5.67) à droite. Dans les encadrés, la quantité $n_i^N(1 - n_i^N)$, prédite par les différentes théories, est tracée pour la constante de couplage normalisée $g / \Delta\epsilon = 0.82$.

approximation raisonnable de l'énergie et des probabilités d'occupation. D'un autre côté, cette illustration rappelle l'effet de seuil qui apparaît dans la théorie BCS lorsque la force de l'interaction d'appariement est faible ($g \ll \Delta\epsilon$). Notons que le seuil est aussi observé lorsqu'on applique la projection dans le cadre de la PAV. Finalement, comme nous avons déjà pu le constater dans la fin du chapitre précédent, la fonctionnelle pour l'appariement obtenue à partir d'une fonction d'essai de type PBCS permet de reproduire de façon remarquable l'énergie et les probabilités d'occupation en particulier près de la limite HF, là où la solution BCS ne permet pas une description correcte de l'effet de l'appariement. Dans la suite de ce chapitre, les propriétés de la fonctionnelle ainsi que la possibilité de la simplifier sont discutées.

6.1.2.1 Discussion sur l'approximation linéaire qui conduit à la fonctionnelle DMFT (Eq. (5.64))

Dans la figure 6.2, la fiabilité de l'approximation linéaire Eq. (5.64) pour reproduire des $\alpha_N(i)$ en fonction des n_i^N est illustrée. Ces quantités sont présentées soit en fonction des probabilités d'occupation n_i^N

(gauche), soit en fonction des énergies à un corps normalisées $\varepsilon_i/\Delta\varepsilon$ (droite). Sur cette figure, les $\alpha_N(i)$ obtenus avec la relation linéaire (5.64) sont tracés pour différentes valeurs de la constante de couplage $g/\Delta\varepsilon = 0.32$ (cercles pleins bleus), 0.64 (croix rouges) et 0.96 (cercles vides noirs) et sont comparés aux coefficients associés à l'état PBCS (respectivement, les lignes pointillée long bleue, pointillée court rouge et continue noir), le tout au minimum des énergies obtenues. Les dépendances des coefficients $\alpha_N(i)$ de l'état de vide de qp projeté ne peuvent pas être entièrement reproduites par l'approximation linéaire en particulier lorsque la force de l'interaction d'appariement est faible. Cela montre que la physique proche de la limite Hartree-Fock est très difficile à reproduire en particulier au niveau des dépendances des n_i^N en fonction des quantités intrinsèques x_i^2 . Malgré tout, l'énergie est très bien reproduite (cf fig. 6.1). Bien qu'il soit possible a priori d'enrichir les dépendances fonctionnelles des $\alpha_N(i)$, par exemple en ajoutant des termes quadratique et cubique, nous avons fait le choix de conserver l'approximation linéaire puisque (a) elle est déjà performante sur une large gamme de couplage (cf. la figure 6.2), (b) ajouter des dépendances alourdirait l'application numérique et de fait, l'intérêt d'utiliser une théorie fonctionnelle.

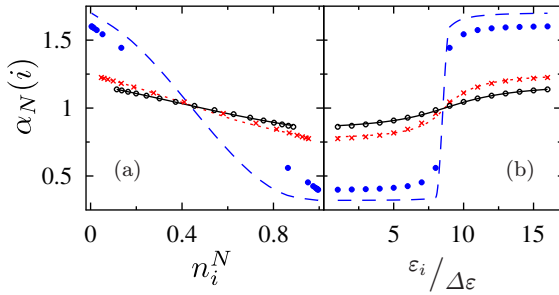


FIG. 6.2: Evolution des coefficients $\alpha_N(i)$ (Eq. 5.45) en fonction des probabilités d'occupation n_i^N (gauche) ou des énergies à un corps normalisées $\varepsilon_i/\Delta\varepsilon$ (droite). Les différentes courbes correspondent au résultat PBCS avec $g/\Delta\varepsilon = 0.32$ (ligne pointillée long, bleue), 0.64 (ligne pointillée court, rouge) et 0.96 (ligne continue, noir), et respectivement les résultats associés à l'approximation linéaire des $\alpha_N(i)$ qui sont tracés respectivement avec des cercles pleins, des croix et des cercles vides.

6.1.2.2 Vérification systématique de la matrice densité à un corps

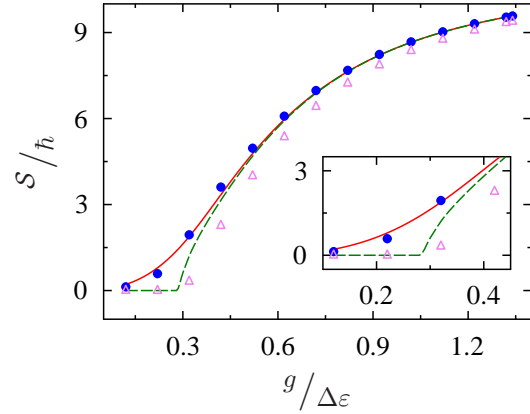
La figure 6.3 permet de comparer de manière systématique les distributions des nombres d'occupation prédites par la fonctionnelle (5.67) et les théories BCS et PAV avec la solution exacte proposée par Richardson. En effet, une théorie de la matrice densité à un corps doit non seulement reproduire l'énergie exacte lorsqu'elle vérifie un minimum mais également les composantes de $\hat{\rho}^1 [N]$, et donc plus particulièrement les probabilités d'occupation n_i^N correspondant aux valeurs propres de cette dernière. Dans ce but, l'entropie à un corps, définie par :

$$\mathcal{S}[n_i^N] = - \sum_i [n_i^N \log(n_i) + (1 - n_i^N) \log(1 - n_i^N)] , \quad (6.8)$$

est utilisée pour mesurer les déviations entre les différentes distributions de n_i^N . Sur cette figure, l'entropie est tracée pour la fonctionnelle (cercles pleins bleus), l'état BCS (ligne pointillée verte), la PAV (triangles violets) et la solution exacte (ligne continue rouge) pour divers couplages. On voit que la fonctionnelle prédit très correctement l'entropie exacte. De même, au-delà du seuil, l'état BCS est très compétitif quant à la PAV appliquée sur le résultat BCS, elle dégrade la distribution des nombres d'occupation (cf. figure 6.1 et la discussion de la section 4.1.1).

Remarquons que les résultats présentés sur cette figure nous permettent d'envisager l'application de cette fonctionnelle dans le cadre de la thermodynamique. En effet, la théorie DMFT cherche à réduire l'information à une classe d'observables, les observables à un corps. Ainsi, les fonctionnelles DMFT peuvent être directement utilisées avec l'entropie ci-dessous dans le cadre de l'ensemble canonique en suivant l'idée proposée par Balian où la réduction de l'information est appliquée à la thermodynamique[127].

FIG. 6.3: Evolution de l'entropie à un corps pour différentes théories en fonction de la constante d'appariement $g/\Delta\varepsilon$ pour 16 particules. Les énergies prédites par les théories BCS (ligne pointillée verte), PAV (triangles violets) et la fonctionnelle (cercles pleins bleus) DMFT pour l'appariement (Eq. 5.67) sont comparées à la solution exacte de Richardson (ligne continue rouge). L'encadré agrandit la zone de faible couplage $g/\Delta\varepsilon \ll 1$.



6.1.2.3 Développement limité de la fonctionnelle pour une forme simplifiée

On peut se poser la question de savoir si une forme simplifiée de cette fonctionnelle permet une description correcte de l'énergie (et des composantes de $\hat{\rho}^{1[N]}$). Par exemple, lorsque les premiers ordres du développement des coefficients $\alpha_N(i)$ ont été illustrés dans la section 5.3 avec la figure 5.6, nous remarquons que ce développement était déjà bon dans la limite de couplage fort. A partir de l'expression resommée (Eq. 5.67), un développement de l'énergie en fonction du rapport (a_1/a_0) peut être obtenu. En effet, près de la limite BCS, on s'attend à trouver $a_0 \rightarrow 1$ et $a_1 \rightarrow 0$ qui correspond à $a_1/a_0 \rightarrow 0$. Ici, au lieu de développer le coefficient $\alpha_N(i)$, nous utilisons l'expression resommée de $\rho_{jjii}^{2[N]}$ pour obtenir l'énergie dans la limite qui nous intéresse. Le premier terme de la série s'écrit alors

$$\rho_{jjii}^{2[N]} = \sqrt{n_i^N(1-n_i^N)}\sqrt{n_j^N(1-n_j^N)} \left(1 - \frac{a_1}{2a_0} (n_i^N(1-n_j^N) + n_j^N(1-n_i^N)) + O\left(\frac{a_1}{a_0}\right) \right). \quad (6.9)$$

La figure 6.4 présente les énergies de corrélation associées aux développements en série jusqu'au terme dominant (Leading Order LO) (haut) et jusqu'au terme de troisième ordre (Next to Next to Leading Order N²LO) (bas) en fonction de la constante d'appariement normalisée $g/\Delta\epsilon$ pour 16 particules. Ces approximations de l'énergie fonctionnelle (cercles pleins bleus) sont comparées à l'énergie exacte (ligne continue rouge) et à la solution BCS (ligne pointillée verte). On voit que l'énergie approchée se retrouve entre les résultats BCS et exacte mais aussi que le seuil BCS n'est corrigé que si le développement est fait à un ordre élevé. Cela confirme l'importance de la resommation pour prendre en compte correctement la limite de couplage faible. Nous proposons dans la suite de vérifier que cette conclusion est valide

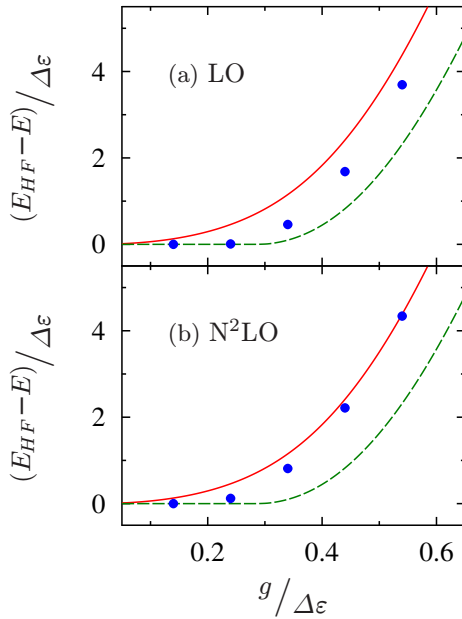


FIG. 6.4: Comparaison entre le premier (haut) et le troisième (bas) ordre en perturbation par rapport à a_1/a_0 , de l'énergie fonctionnelle proposée dans l'Eq. (5.67) qui correspond à l'expression linéaire des $\alpha_N(i)$ (cercles pleins bleus), pour 16 particules. L'évolution de l'énergie de corrélation $E_{HF} - E$ obtenue à partir de la solution exacte (ligne continue rouge) et de la théorie BCS (ligne pointillée verte) sont présentées à titre de référence.

dans le cadre des systèmes pairs ou impairs, avec des spectres d'énergie à un corps quelconques mais aussi de vérifier l'applicabilité de la fonctionnelle pour un grand nombre de particules.

6.1.3 Applications

Dans cette section, nous proposons un certain nombre d'applications de la fonctionnelle obtenue dans le chapitre 5, dans le cas de l'Hamiltonien de Richardson pour différentes valeurs des paramètres du modèle. Il est important de vérifier que cette fonctionnelle offre bien une alternative à la fonctionnelle BCS tout en gardant le côté "pratique" des théories DFT et en particulier la possibilité de pouvoir les appliquer à des systèmes de grandes dimensions. En physique nucléaire, les théories EDF sont connues pour pouvoir décrire l'ensemble de la charte des noyaux, i.e. $N \approx 10 \rightarrow 200$ (neutrons ou protons). Pour réaliser ces objectifs, les études réalisées dans les références [103, 104] ont été reprises pour tester la fonctionnelle pour l'appariement proposée dans le chapitre précédent.

6.1.3.1 Les systèmes impairs vs pairs

Ci-dessous, la fonctionnelle développée pour l'appariement est appliquée aux systèmes impairs en nous inspirant des techniques de blocking[3] utilisées ici pour décrire les états excités associés aux vides de qp. En particulier pour décrire les systèmes impairs, il est possible d'utiliser des états d'une quasi-particule (cf. section 2.1.2)

$$|\Psi\rangle = b_i^\dagger |-\rangle_{qp} . \quad (6.10)$$

Le blocking est une méthode où on impose que l'orbitale ψ_i associée à b_i^\dagger (de même que $\psi_{\bar{i}}$ pour assurer la symétrie par renversement du temps) soit peuplée par la particule non appariée. A ce titre, celle-ci ne participe pas au mélange qui définit l'opérateur de création de paire $\Gamma^\dagger(\alpha)$ (Eq. 6.5). Dans le cas de PBCS ou de la solution de Richardson, on peut utiliser les états qui correspondent à la projection d'un état de une qp, c'est-à-dire

$$\begin{aligned} |\Psi^{2N+1}\rangle &\propto (a_i^\dagger + a_{\bar{i}}^\dagger) \left(\Gamma^\dagger\{i\} \right)^N |-\rangle && \text{pour PBCS ,} \\ |\Psi^{2N+1}\rangle &\propto (a_i^\dagger + a_{\bar{i}}^\dagger) \prod_{\alpha}^N \Gamma^\dagger\{i\}(\alpha) |-\rangle && \text{pour Richardson ,} \end{aligned} \quad (6.11)$$

où nous avons imposé la conservation de l'invariance par renversement du temps et avons noté $\Gamma^\dagger\{i\}$ pour signifier que les états ψ_i et $\psi_{\bar{i}}$ sont retirés de l'opérateur de création de paires. Les états i et \bar{i} sont choisis comme les derniers états occupés dans la limite Hartree-Fock, et leurs probabilités d'occupation sont bloquées, i.e. fixées. La conservation du nombre de particules impose que $n_i^N = n_{\bar{i}}^N = 0.5$. Pour illustrer l'effet pair-impair associé à la différence d'énergie entre les systèmes de nombre de particules pair et ceux de nombre de particules impair, un gap moyen $\bar{\Delta}$ peut être défini comme

$$\bar{\Delta} = \frac{E_{HF} - E}{\sum_{k \neq i} \sqrt{n_k(1 - n_k)}} . \quad (6.12)$$

Ce dernier s'identifie, à un facteur $1/g$ près, au gap dans la limite BCS.

Dans la figure 6.5, l'évolution du gap moyen normalisé par le nombre de particules et l'espacement moyen des énergies à un corps $\Delta\varepsilon$ est tracée en fonction du nombre de particules total A , dans le cas de la solution exacte (ligne solide rouge), de la théorie BCS (ligne pointillée verte) et de la fonctionnelle (cercles pleins bleus). Les systèmes pairs sont présentés à gauche et ceux impairs sont donnés à droite de façon à mettre en évidence l'effet pair-impair. Cette figure montre que la fonctionnelle proposée pour l'appariement prédit correctement $\bar{\Delta}/(A\Delta\varepsilon)$ aussi bien dans le cas de systèmes pairs que pour des systèmes impairs. Elle montre également qu'elle peut être utilisée pour décrire des systèmes avec un grand nombre de particules. Parmi les trois valeurs $g/\Delta\varepsilon = 0.66$ (haut), 0.44 (milieu) et 0.224 (bas) tracées sur cette figure, on voit apparaître des différences entre la solution fonctionnelle et la solution

exacte lorsque $g \ll \Delta\varepsilon$. Ces dernières rappellent que la limite de faible couplage reste difficile à décrire avec la seule approximation linéaire proposée pour $\alpha_N(i)$. Les encadrés de la figure présentent les

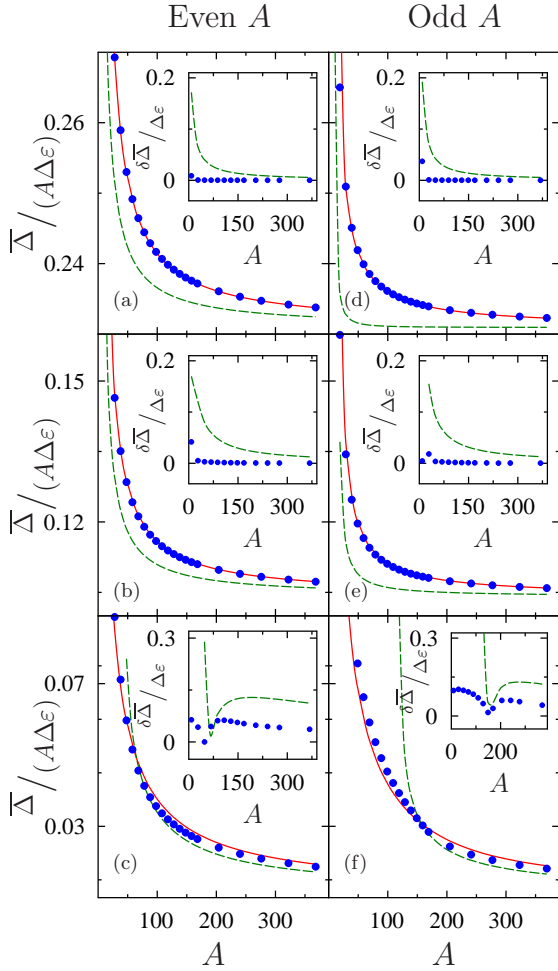


FIG. 6.5: Evolution de la quantité $\bar{\Delta}/(A \Delta\varepsilon)$ proportionnelle au gap de la théorie BCS, en fonction du nombre de particules A pour des systèmes pairs (gauche) et des systèmes impairs (droite), tracée de haut en bas, pour trois valeurs différentes de la constante d'appariement, respectivement $g/\Delta\varepsilon = 0.66, 0.44$ et 0.224 . Dans chaque cas, les résultats correspondant aux théories de BCS (ligne pointillée verte) et de la fonctionnelle (cercles pleins bleus) de la matrice densité pour l'appariement (Eq. 5.67) sont comparés à la solution exacte de Richardson (ligne continue rouge). Pour certaines valeurs de la constante d'appariement $g/\Delta\varepsilon = 0.224$ en dessous du seuil de la théorie BCS, l'énergie de corrélation associée est nulle ce qui entraîne que $\bar{\Delta}/(A \Delta\varepsilon) = 0$, c'est pourquoi on voit apparaître sur cette figure une discontinuité dans les résultats de la théorie BCS. Dans les encadrés, les déviations par rapport à la solutions exacte, normalisées à un, de la théorie BCS (ligne pointillée verte) et de la fonctionnelle (cercles pleins bleus) sont présentées.

déviations, normalisées à l'unité, du gap moyen de BCS et de la fonctionnelle par rapport à la solution exacte. On remarque finalement que la précision de la nouvelle fonctionnelle est identique dans les cas pair et impair ce qui n'est pas le cas pour BCS. Nous proposons par la suite d'évaluer la précision de la solution fonctionnelle à partir d'études faites dans le domaine des grains métalliques.

6.1.3.2 Limite d'un grand nombre de particules

Il est important de vérifier que la fonctionnelle (Eq. 5.67) peut décrire la limite d'un grand nombre de particules au moins aussi bien que la théorie BCS qui converge vers la solution exacte[128] dans le cas où $N \rightarrow \infty$. Des travaux ont été réalisés dans le cadre de la description des grains métalliques de faible taille et ont montré que l'état PBCS quoique globalement satisfaisant, dévie de la solution exacte pour un

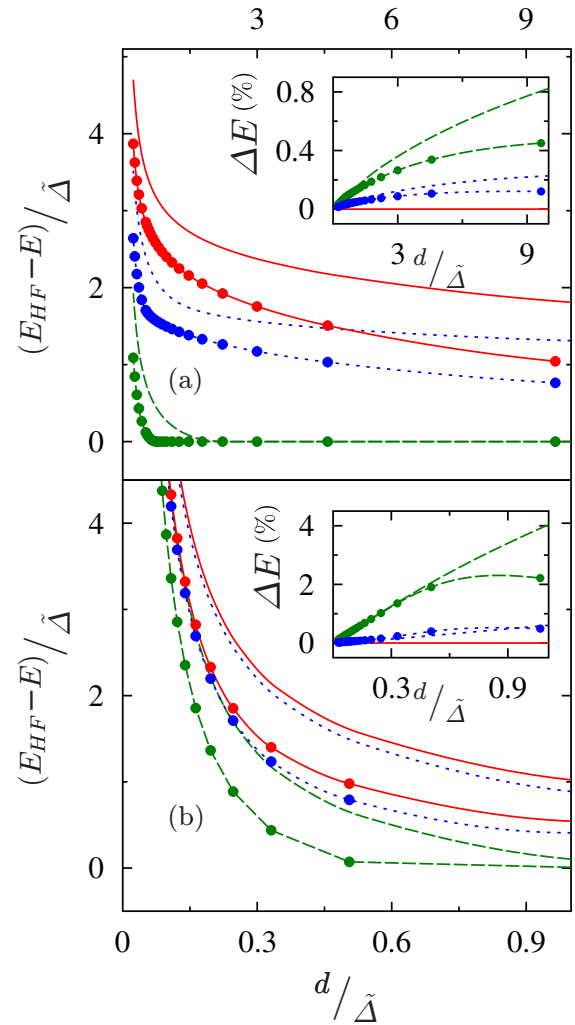
nombre de particules modéré[115]. Puisque la fonctionnelle que nous proposons est basée sur cet état, nous nous attendons au même type de comportement.

Dans les systèmes de grains métalliques, le gap de volume $\tilde{\Delta}$ est défini pour paramétrer les grains ainsi que la relation suivante qui relie l'espacement moyen des énergies à un corps $\Delta\varepsilon$, au nombre total de particules A et la constante de l'appariement g

$$\frac{\Delta\varepsilon}{\tilde{\Delta}} \equiv \frac{2}{A} \sinh(1/g) . \quad (6.13)$$

Nous reprenons ici de revisiter les travaux réalisés dans les références[115, 129, 130] en utilisant la nouvelle fonctionnelle. La relation ci-dessus permet de comparer précisément les énergies prédites par les

FIG. 6.6: L'évolution de l'énergie de corrélation $E_{HF} - E$ normalisée par $\tilde{\Delta}$ prédite par la théorie BCS (ligne pointillée long verte) et la fonctionnelle pour l'appariement (ligne pointillée court bleue) donnée par l'Eq. (5.67), est comparée à la solution exacte de Richardson (ligne continue rouge) en fonction du paramètre $\Delta\varepsilon/\tilde{\Delta}$ correspondant aux valeurs suivantes de la constante d'appariement $g/\Delta\varepsilon = 0.224$ (haut) et $g/\Delta\varepsilon = 0.44$ (bas). Les courbes représentant les systèmes pairs et les systèmes impairs sont tracées séparément et sont repérées par des cercles pleins dans le cas des systèmes impairs et ce quelle que soit la théorie utilisée pour calculer l'énergie. Les encadrés présentent les erreurs relatives des énergies prédites par chaque théorie par rapport à la solution exacte, en pourcentage.



différentes théories dans le cas de systèmes pair et impair en faisant varier l'espacement des énergies à un corps et la constante de couplage. Sur la figure 6.6, l'énergie de corrélation est tracée en fonction du gap de volume et de l'espacement moyen des ε_i , $\Delta\varepsilon/\tilde{\Delta}$ et correspond à $g/\Delta\varepsilon = 0.224$ (haut) et à $g/\Delta\varepsilon = 0.44$ (bas). Sur cette figure, le nombre de particules varie de $A = 8$ (grand $\Delta\varepsilon/\tilde{\Delta}$) à $A = 360$

(petit $\Delta\varepsilon/\tilde{\Delta}$). On voit sur cette figure que la fonctionnelle améliore comme attendu la reproduction de l'énergie exacte par rapport à la solution BCS. Toutefois, comme remarqué précédemment, il reste des différences avec l'énergie exacte. Cependant, ces dernières correspondent à des erreurs inférieures au pourcent. Les encadrés de la figure 6.6 donnent les différences ΔE entre les énergies calculées et les énergies exactes (en %). On remarque également que la fonctionnelle prédit correctement la limite d'un grand nombre de particules alors que dans le cas intermédiaire, des différences plus importantes sont observées. Ces dernières sont associées à l'approximation linéaire que nous avons utilisée pour obtenir l'expression de la fonctionnelle mais sont aussi associées à l'état auxiliaire PBCS qui reste une approximation de la solution de Richardson. Il a été montré, à ce titre, que cet état ne reproduit pas tout à fait l'énergie exacte dans ce domaine[115]. Il est intéressant de comparer les résultats de cette figure avec ceux des références [115, 129, 130] où la solution PBCS (VAP) est donnée. On peut alors remarquer que l'effet de l'approximation linéaire dans l'expression fonctionnelle des $\alpha_N(i)$ fait que l'énergie de corrélation est mal reproduite dans la limite HF ($g \rightarrow 0$). Pour compléter la vue d'ensemble, il est important d'appliquer la nouvelle fonctionnelle à un spectre d'énergie à un corps quelconque comme cela a été fait dans le cadre des petits grains métalliques. Ce dernier cas nous rapproche de l'application réaliste en physique nucléaire où, par exemple dans les théories EDF, les spectres d'énergie à un corps sont obtenus de façon auto-consistante.

6.1.3.3 Spectres d'énergies à un corps quelconques

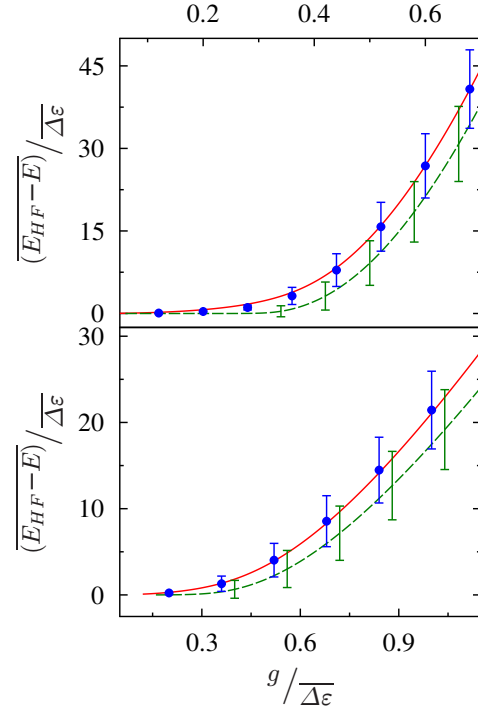
La résolution numérique de l'Hamiltonien de Richardson a été étendue au cas de spectres d'énergies à un corps quelconques. Pour cela, nous utilisons les travaux des références [115, 131] où un ensemble d'énergies $\{\varepsilon_i\}$ est généré à partir des valeurs propres d'une matrice aléatoire de dimension $2A \times 2A$. Ainsi, ces énergies appartiennent à l'ensemble orthogonal gaussien[132]. Nous utilisons la renormalisation proposée dans la référence[131],

$$\varepsilon \longrightarrow 1/2\pi \left[4A \sin^{-1} \left(\varepsilon/\sqrt{4A} \right) - \varepsilon \sqrt{4A - \varepsilon^2} \right] \quad (6.14)$$

qui permet de normaliser l'espacement moyen sur l'ensemble des spectres ($\overline{\Delta\varepsilon}$) à l'unité. Dans la figure 6.7, nous illustrons les évolutions de l'énergie moyennées sur l'ensemble de spectres générés et ses fluctuations statistiques en fonction de la constante d'appariement normalisée $g/\overline{\Delta\varepsilon}$. Les résultats obtenus avec la fonctionnelle pour l'appariement proposée dans ce travail (cercles bleus pleins) et la fonctionnelle BCS (ligne pointillée verte) sont présentés. On voit que la fonctionnelle marche très bien avec des spectres d'énergies à un corps quelconque et on retrouve la tendance de la solution exacte (ligne rouge) qui est tracée ici comme référence et obtenue dans le cas d'un spectre en énergie équidistant. Cette figure montre qu'il est possible d'utiliser la fonctionnelle dans le cas d'ensemble de $\{\varepsilon_i\}$ très variés tels qu'en physique nucléaire pour décrire les noyaux. Cela nous permet d'envisager son application dans ce

contexte.

FIG. 6.7: L'énergie de corrélation moyenne $\overline{E_{HF} - E}$ normalisée par l'espacement statistique moyen des énergies à un corps $\overline{\Delta\epsilon}$ et ses fluctuations statistiques sont tracées en fonction de la constante d'appariement normalisée $g/\overline{\Delta\epsilon}$ pour 41 particules (haut) et 16 particules (bas) dans les différentes théories BCS et de la fonctionnelle de la matrice densité proposée dans le chapitre 5. Les énergies BCS (ligne pointillée verte) et celle obtenue à partir de la fonctionnelle pour l'appariement (cercles pleins bleus) sont comparées à l'énergie exacte (ligne continue rouge) tracée dans le cas d'un espacement constant unitaire, utilisé comme référence.



6.2 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons discuté les approximations et simplifications possibles de la fonctionnelle pour l'appariement proposée à partir des états PBCS et de l'approximation (5.64) présentés dans le chapitre précédent. La précision de l'approximation linéaire utilisée pour donner les x_i^2 est discutée. On remarque qu'elle est très compétitive dans le cas d'un couplage fort et reste compétitive proche de la limite HF bien que des termes d'ordre supérieur amélioreraient la qualité de l'approximation. La reproduction de l'énergie et des probabilités d'occupation quels que soient les paramètres utilisés est discutée. Cette fonctionnelle peut également être utilisée pour obtenir des formes simplifiées capables de décrire la solution exacte dans des régions données, ce que nous avons illustré dans le cas de la limite BCS (limite de grand nombre de particules). Enfin, nous proposons de vérifier son applicabilité à un ensemble de problèmes. En particulier dans le cadre de la description des systèmes impairs (et pairs) nous montrons qu'elle peut reproduire correctement l'énergie obtenue de la même façon à partir des états de Richardson. La limite d'un grand nombre de particule est également correctement prédite par la fonctionnelle et on montre qu'elle présente les mêmes défauts que l'utilisation d'un état de quasi-particules projeté dans une approche VAP. Finalement, nous l'avons appliquée dans le cas de spectres en énergie à un corps quelconques. Cette dernière mise en pratique montre qu'il sera possible d'utiliser cette fonctionnelle dans

le cas de systèmes nucléaires réalistes et complète l'étude sur la construction de cette énergie DMFT adaptée pour l'appariement.

Conclusions

Dans ce travail, nous avons cherché à traiter l'appariement ainsi que le problème de la restauration de la conservation du nombre de particules dans les théories de l'énergie fonctionnelle de la densité (EDF) utilisées en physique nucléaire. Dans un premier temps, nous avons essayé de comprendre comment, et sous quelles conditions, la méthode MR-EDF, qui permet, en particulier, la restauration des bons nombres quantiques, peut être interprétée comme une théorie fonctionnelle. Cela a conduit à généraliser les théories actuelles basées sur un seul vide en utilisant, non plus un état de quasi-particules, mais sa projection (théorie SC-EDF) sur l'espace de Fock de N particules. Puis, en suivant une voie parallèle, nous avons construit une fonctionnelle de la matrice densité à un corps (DMFT) pouvant être utilisée dans les petits supraconducteurs et en physique nucléaire pour corriger les effets de taille finie associés à la brisure de la conservation du nombre de particules.

Dans la première partie de ce mémoire de thèse, la stratégie utilisée en physique nucléaire pour décrire les propriétés des noyaux avec les théories fonctionnelles est rappelée. En particulier, bien que l'interaction entre les nucléons soit très compliquée, il est possible d'en reproduire les effets, dans le milieu nucléaire, en construisant un modèle de particules (quasi-particules) indépendantes à partir d'interactions effectives. Ces approches, appelées aussi de champ moyen, rentrent dans le cadre des théories fonctionnelles où le problème à N -corps, très compliqué, est remplacé par un problème à un corps, plus simple à résoudre. Les effets à N -corps permettant de prédire l'énergie du système et ses propriétés à un corps sont alors contenus dans les dépendances fonctionnelles de l'énergie. Ce cadre définit les approches SR-EDF.

L'appariement est un des types de corrélation nécessaire pour décrire les énergies des noyaux et la spectroscopie nucléaire. Guidé par la théorie de Bardeen, Cooper et Schrieffer (et/ou Hartree, Fock et Bogoliubov), il est possible d'étendre la fonctionnelle SR-EDF pour qu'elle inclue les corrélations d'appariement. Toutefois, cela se fait au prix de ne plus respecter la conservation du nombre de particules. Les théories SR-EDF peuvent briser des symétries et de ce fait permettent de décrire plus précisément le noyau dans son état intrinsèque. C'est une des forces de ces théories que nous avons illustrée par plusieurs exemples. Toutefois, pour avoir une description fidèle du noyau, il est nécessaire

de restaurer les bons nombres quantiques associés et, dans le cas d'une brisure spontanée de symétrie, de prendre en compte les fluctuations de la variable collective d'intérêt. Dans le cas Hamiltonien, ceci se fait avec la méthode de la coordonnée génératrice. Par analogie, on utilise, dans les théories EDF, la méthode MR-EDF.

Outre la possibilité de restaurer les bons nombres quantiques, la théorie MR-EDF permet de décrire de nombreuses propriétés des noyaux telles que les états excités, les fluctuations des paramètres d'ordre etc... Toutefois, elle pose de nombreux défis théoriques. En particulier lorsque des fonctionnelles et le mélange de configurations sont combinés. Nous avons rappelé les récents travaux à ce sujet. Ils mettent en évidence les problèmes de sauts et de divergences dans les énergies prédites par la méthode MR-EDF lorsqu'elle est utilisée pour restaurer, par exemple, le nombre de particules. Ces observations mettent en avant des problèmes de fond quant aux fondements même des méthodes MR-EDF et soulèvent les questions présentées en introduction de ce mémoire. Dans cette thèse, une analyse détaillée de comment la régularisation proposée récemment permet de résoudre les problèmes de divergences liés à la projection sur l'espace des états de N particules est présentée. Nous avons montré que l'énergie MR-EDF corrigée est équivalente à une formulation fonctionnelle des densités des états de vide de quasi-particules et de sa projection. Cette analyse a permis de clarifier certains points clefs reliés à l'utilisation du mélange de configurations avec EDF et a conduit aux conclusions suivantes :

1. Dans le cas particulier de la restauration du nombre de particules, ce travail montre que la formulation MR-EDF corrigée peut être interprétée comme une méthode fonctionnelle. Ainsi, il peut constituer un argument en faveur de l'utilisation des méthodes MR-EDF.
2. Nous avons profité de la non-unicité de la méthode de régularisation pour proposer une méthode MR-EDF régularisée qui s'identifie à une théorie fonctionnelle des densités de l'état projeté seulement. Cela revient à utiliser un état auxiliaire de type vide de quasi-particules projeté combiné avec une interaction effective par exemple de type Skyrme. A ce titre, il est équivalent de considérer cette nouvelle fonctionnelle comme une généralisation des méthodes SR-EDF actuelles, appelée Symmetry-Conserved-EDF puisque les dépendances fonctionnelles font que la brisure puis la restauration de la symétrie de jauge $\mathcal{U}(1)$ sont prises en compte simultanément.
3. Puisque nous avons retrouvé le cadre fonctionnel avec l'étape SC-EDF, il a été possible de réintroduire des dépendances fonctionnelles qui ne peuvent pas être régularisées lorsqu'on utilise une méthode MR-EDF. Ainsi, les paramétrisations des forces effectives nucléaires qui contiennent des dépendances non entières de la densité ont pu être utilisées avec la méthode SC-EDF. Ce point est très important puisque la majorité des forces effectives utilisées en physique nucléaire contient

ce type de dépendances permettant de décrire, entre autres, la densité nucléaire à la saturation.

La fonctionnelle SC-EDF peut être utilisée dans un principe variationnel, on appelle en général cette méthode variation après la projection (VAP). A l'aide des méthodes de récurrence qui permettent de calculer facilement les valeurs moyennes d'observables sur un vide de quasi-particules projeté, nous avons donné l'expression de tous les éléments des matrices densités de cet état en fonction de ses probabilités d'occupation et de celles de l'état de vide de qp sous-jacent. Cela simplifie considérablement l'utilisation pratique d'états projetés sur l'espace de Fock de N particules. Les équations auto-consistantes associées à la minimisation de l'énergie par rapport à tous les degrés de liberté de l'état ont été présentées et une méthode numérique adaptée a été proposée pour résoudre le problème de façon approchée dans un premier temps. Nous avons illustré que, dans le principe, il est possible de réaliser la minimisation SC-EDF de façon auto-consistante en présentant des résultats préliminaires. Cette nouvelle approche, qui se classe parmi les méthodes SR-EDF, a l'avantage de pouvoir utiliser tous les types de fonctionnelles et d'être compatible avec la méthode MR-EDF appliquée a posteriori puisque la minimisation est faite par rapport au vide de qp sous-jacent. De plus, les résultats préliminaires montrent que la fonctionnelle SC-EDF permet bien de corriger les défauts des théories SR-EDF basées sur un vide de qp qui, lorsque la force de l'appariement est faible telle que dans les noyaux simple ou doublement magique, ne prédisent aucune corrélation d'appariement.

Dans un second temps, nous avons proposé d'écrire l'énergie comme une fonctionnelle de la matrice densité à un corps (DMFT) de l'état projeté seulement. Ce type de fonctionnelle rentre dans le cadre d'une extension du théorème d'existence de Kohn et Sham proposée par Gilbert. Dans l'approche DMFT, les dépendances fonctionnelles de l'énergie sont construites à partir de la densité à un corps non-locale contrairement à la DFT classique où elle dépend de la matrice densité à un corps locale. Ainsi, les dépendances fonctionnelles peuvent être non seulement écrites en fonction des orbitales à un corps, comme dans la méthode de Kohn et Sham, mais aussi en fonction des probabilités d'occupation des particules sur ces orbitales. Ces dernières correspondent aux éléments diagonaux de la matrice densité à un corps. Par exemple, l'état BCS qui décrit la supraconductivité électronique correspond à une énergie fonctionnelle de la matrice densité à un corps. Il est alors naturel de chercher si à partir de cette fonctionnelle il est possible d'en élaborer une nouvelle qui permet de décrire correctement les corrélations d'appariement proche de la limite Hartree-Fock où l'énergie de corrélation BCS souffre d'effets de seuil.

La méthode que nous avons utilisée, à l'instar de la théorie SC-EDF, est de considérer l'état projeté comme un état auxiliaire à partir duquel on construit les composantes de sa matrice densité à un corps. En utilisant les propriétés de cet état, il est possible de montrer que l'énergie peut être écrite comme une

fonction des orbitales et des nombres d'occupation des états sous-jacent et projeté. Si les probabilités d'occupation intrinsèques peuvent être exprimées en fonction de celles de l'état de référence SC-EDF alors l'énergie rentre dans le cadre des fonctionnelles DMFT. Nous avons montré que c'est le cas. Toutefois, les dépendances sont très compliquées à résoudre. C'est pourquoi, dans le but d'obtenir une fonctionnelle DMFT explicite, un développement en $1/N$ est proposée, il permet, dans la limite d'un grand nombre de particules, d'identifier l'expression de l'énergie BCS. Toutefois, pour pouvoir décrire l'appariement proche de la limite Hartree-Fock, il est nécessaire de prendre en compte tous les termes du développement, c'est pourquoi la fonctionnelle DMFT pour l'appariement qui est proposée dans ce travail, resomme, de façon approchée, tous ces termes. Cela permet en particulier de retrouver les bonnes dépendances fonctionnelles dans cette limite.

La nouvelle fonctionnelle a été testée avec l'Hamiltonien de Richardson qui peut être résolu exactement. Dans le but de vérifier le pouvoir prédictif de la fonctionnelle proposée, il a été vérifié que quels que soient les paramètres du modèle, l'énergie et les nombres d'occupation étaient correctement reproduits. Des systématiques en fonction de la constante d'appariement, du nombre de nucléons sont présentées. La fonctionnelle a été testée dans le cas de systèmes impairs à l'aide de la théorie de blocking et d'un état d'une qp projeté. Enfin, nous avons montré qu'elle peut être appliquée à n'importe quel type de spectre d'énergie à un corps.

En résumé, nous avons exploré deux voies qui sont applicables directement dans les méthodes EDF en physique nucléaire. La première permet de comprendre le mélange de configurations quand il est combiné à une théorie EDF. Cela a conduit à définir un nouvel état auxiliaire qui tient compte des corrélations d'appariement et conserve le nombre de particules. Il consiste à utiliser une nouvelle stratégie SR-EDF où la brisure puis la restauration des symétries sont prises en compte (SC-EDF).

La seconde voie propose de développer une fonctionnelle dépendant des composantes de la matrice densité à un corps de l'état de référence. Dans ce cas, on se place dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la matrice densité.

Dans ces deux approches, le problème de l'appariement dans les systèmes de taille finie est traité correctement, fournissant ainsi une bonne description des phénomènes associés.

Les nouvelles formes fonctionnelles, proposées dans ce mémoire, pourront être utilisées dans le cadre de la dynamique et de la thermodynamique en formant un socle commun pour décrire les phénomènes nucléaires. De plus, il est important dans l'avenir d'étendre ces études à d'autres types de restauration par exemple la restauration de l'invariance par les rotations. Cette symétrie est toutefois bien plus complexe que le cas auquel nous nous sommes intéressés dans cette thèse.

Correspondance avec les travaux de référence de Dietrich

Dans cette annexe, nous proposons de redériver les équations VAP de la référence [97] avec les notations utilisées dans cette thèse.

A.0.1 Identification des quantités

Les quantités R_n^N sont les valeurs moyennes des densités à n corps, où N correspond au nombre de paires de l'état PBCS et où N dénote le nombre d'états à un corps retirés du mélange. Dans la référence [97], l'équation de récurrence (B1) s'écrit

$$R_{n+1}^{N+1}(\nu_1, \dots, \nu_N, j) v_j^2 + R_n^{N+1}(\nu_1, \dots, \nu_N, j) u_j^2 = R_n^N(\nu_1, \dots, \nu_N) ,$$

où ν_i repère les états à un corps retirés du mélange. Cette relation est tout à fait équivalente à la relation de récurrence 4.16 à une constante de normalisation près. Dans la suite de cette annexe, nous utilisons l'identification suivante $R_{n+1}^{N+1}(\nu_1, \dots, \nu_N, j) \equiv I^{N-n-1}(i_1, \dots, i_N, j)$ et prenons en compte le facteur de normalisation $\prod (u_k^2)$.

A.0.2 Identification des équations du minimum

Dans la référence [97] les équations du minimum sont écrites à l'aide des quantités suivantes

$$\begin{aligned} \varepsilon_i &= (p_i + 2\bar{v}_{i\bar{i}\bar{i}\bar{i}}) \frac{I^{N-1}(i)}{I^N} \\ \Gamma_i &= 4 \sum_j (\bar{v}_{ijj\bar{j}} + \bar{v}_{i\bar{j}\bar{j}j}) v_j^2 \frac{I^{N-2}(i, j)}{I^N} \\ \Delta_i &= 2 \sum_j \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}} u_j v_j \frac{I^{N-1}(i, j)}{I^N} , \end{aligned} \tag{A.1}$$

où p_i correspond à la contribution cinétique et \bar{v} est une interaction à deux corps quelconque, et de

$$\begin{aligned}
\Lambda_i &= \sum_j (\varepsilon_i + 2\bar{v}_{j\bar{j}j\bar{j}}) v_j^2 \frac{(I^N - |x_i|^2 I^{N-1}(i)) I^{N-2}(i, j) - I^{N-1}(i) I^{N-1}(i, j)}{I^{N^2}} \\
&+ 2 \sum_{jk} (\bar{v}_{jkjk} + \bar{v}_{j\bar{k}j\bar{k}}) v_j^2 v_k^2 \frac{(I^N - |x_i|^2 I^{N-1}(i)) I^{N-3}(i, j, k) - I^{N-1}(i) I^{N-2}(i, j, k)}{I^{N^2}} \\
&+ 2 \sum_{jk} \bar{v}_{j\bar{k}j\bar{k}} u_j u_k v_j v_k \frac{(I^N - |x_i|^2 I^{N-1}(i)) I^{N-2}(i, j, k) - I^{N-1}(i) I^{N-1}(i, j, k)}{I^{N^2}} \\
&+ [\varepsilon_i v_i^2 + \Gamma_i v_i^2 + 2\Delta_i u_i v_i] \frac{I^N(i) - I^{N-1}(i)}{I^N} .
\end{aligned} \tag{A.2}$$

L'application du principe variationnel par rapport aux v_i donne

$$(\varepsilon_i + \Gamma_i + \Lambda_i) u_i v_i + \Delta_i (u_i^2 - v_i^2) = 0 . \tag{A.3}$$

En prenant en compte la constante de normalisation l'énergie totale s'écrit sous la forme de

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_N[\Psi_N] &= 2 \sum_k \varepsilon_k x_k^2 \frac{I^{N-1}(k)}{I^N} + 4 \sum_k \bar{v}_{k\bar{k}k\bar{k}} x_k^2 \frac{I^{N-1}(k)}{I^N} \\
&+ 4 \sum_{jk} (\bar{v}_{jkjk} + \bar{v}_{j\bar{k}j\bar{k}}) x_k^2 x_j^2 \frac{I^{N-2}(k, j)}{I^N} + 4 \sum_{jk} \bar{v}_{j\bar{k}j\bar{k}} x_k x_j \frac{I^{N-1}(k, j)}{I^N} .
\end{aligned} \tag{A.4}$$

- Réécriture des termes proportionnels à ε_i du type de

$$\begin{aligned}
v_i^2 \frac{I^{N-1}(i)}{I^N} \left(1 + v_i^2 \frac{I^N(i) - I^{N-1}(i)}{I^N} \right) &= u_i^2 n_i^N \left(1 + x_i^2 \left(1 - (1 + x_i^2) \frac{I^{N-1}(i)}{I^N} \right) \right) \\
&= u_i^2 n_i^N \left(1 + x_i^2 \left(1 - (1 + x_i^2) n_i^N \frac{u_i^2}{v_i^2} \right) \right) \\
&= u_i^2 n_i^N \left(1 + x_i^2 \left(1 - \frac{n_i^N}{v_i^2} \right) \right) = n_i^N (1 - n_i^N) .
\end{aligned} \tag{A.5}$$

- Pour compléter l'identification des ε_i , on doit également réécrire la quantité

$$\begin{aligned}
&x_i^2 x_j^2 \frac{(I^N - |x_i|^2 I^{N-1}(i)) I^{N-2}(i, j)}{(I^N)^2} - x_i^2 x_j^2 \frac{I^{N-1}(i) I^{N-1}(i, j)}{(I^N)^2} \\
&= x_i^2 x_j^2 \left(\frac{I^{N-2}(i, j)}{I^N} - \frac{x_i^2 I^{N-2}(i, j) + I^{N-1}(i, j) I^{N-1}(i)}{I^N} \right) \\
&= x_i^2 x_j^2 \frac{I^{N-2}(i, j)}{I^N} - n_i^N n_j^N .
\end{aligned} \tag{A.6}$$

- De la même manière de ci-dessus, on peut réécrire

$$\begin{aligned}
&= x_j^2 x_i^2 x_k^2 \left\{ \frac{I^{N-3}(i, j, k)}{I^{N^2}} (I^N - x_i^2 I^{N-1}(i)) - \frac{I^{N-1}(i) I^{N-2}(i, j, k)}{I^{N^2}} \right\} \\
&= x_j^2 x_i^2 x_k^2 \left\{ \frac{I^{N-3}(i, j, k)}{I^N} - \frac{x_i^2 I^{N-3}(i, j, k) + I^{N-2}(i, j, k) I^{N-1}(i)}{I^N} \right\} \\
&= x_j^2 x_i^2 x_k^2 \left\{ \frac{I^{N-3}(i, j, k)}{I^N} - \frac{I^{N-2}(j, k) I^{N-1}(i)}{I^N} \right\} \\
&= x_j^2 x_i^2 x_k^2 \left\{ \frac{I^{N-2}(k, i) - I^{N-2}(j, i)}{(x_k^2 - x_j^2) I^N} - \frac{I^{N-1}(k) - I^{N-1}(j) I^{N-1}(i)}{(x_k^2 - x_j^2) I^N} \right\} . \quad (\text{A.7})
\end{aligned}$$

- Enfin, les quantités Γ_i et Δ_i peuvent se réécrire de la même façon que ε_i

$$\Gamma_i v_i^2 \left(1 + \frac{v_i^2}{u_i^2} \left(1 - \left(1 + \frac{v_i^2}{u_i^2} \right) \frac{u_i^2}{v_i^2} n_i^N \right) \right) = \Gamma_i x_i (1 - n_i^N) , \quad (\text{A.8})$$

et

$$\Delta_i \left(1 - 2v_i^2 + 2v_i^2 \left(1 - \frac{n_i^N}{v_i^2} \right) \right) = \Delta_i (1 - 2n_i^N) . \quad (\text{A.9})$$

Nous pouvons alors identifier termes à termes la dérivation Eqs. (4.40).

Bibliographie

- [1] R. Balian, *From Microphysics to Macrophysics* (Springer-Verlag, 1992) p. 607.
- [2] M. Bender, G. F. Bertsch, and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 102503 (2005).
- [3] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, 1980).
- [4] J. Dobaczewski, M. V. Stoitsov, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard, *Phys. Rev. C* **76**, 054315 (2007).
- [5] D. Lacroix, T. Duguet, and M. Bender, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.79.044318> *Phys. Rev. C* **79**, 044318 (2009).
- [6] T. Duguet and J. Sadoudi, *J. Phys. G* **37**, 064009 (2010).
- [7] L. M. Robledo, *J. Phys. G* **37**, 064020 (2010).
- [8] D. Lacroix and G. Hupin, *Phys. Rev. B* **82**, 144509 (2010).
- [9] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [10] T. Gilbert, *Phys. Rev. B* **12**, 2111 (1975).
- [11] S. Goedecker and C. Umrigar, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 866 (1998).
- [12] M. Levy and J. P. Perdew, *Phys. Rev. A* **32**, 2010 (1985).
- [13] R. W. Richardson and N. Sherman, *Nucl. Phys.* **52**, 221 (1964).
- [14] R. Machleidt, *Phys. Rev. C* **63**, 024001 (2001).
- [15] V. G. J. Stoks, R. A. M. Klomp, C. P. F. Terheggen, and J. J. de Swart, *Phys. Rev. C* **49**, 2950 (1994).
- [16] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks, and R. Schiavilla, *Phys. Rev. C* **51**, 38 (1995).
- [17] N. Ishii, S. Aoki, and T. Hatsuda, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.022001> *Phys. Rev. Lett.* **99**, 022001 (2007).
- [18] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, and J. Schnack, *Nucl. Phys. A* **632**, 61 (1998).
- [19] S. K. Bogner, T. T. S. Kuo, and A. Schwenk, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2003.07.001> *Phys. Rep.* **386**, 1 (2003).

- [20] S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, and R. J. Perry, *Phys. Rev. C* **75**, 061001 (2007).
- [21] J. E. Drut, R. J. Furnstahl, and L. Platter, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ppnp.2009.09.001> *Prog. Part. Nucl. Phys.* **64**, 120 (2010).
- [22] K. A. Brueckner and C. A. Levinson, *Phys. Rev.* **97**, 1344 (1955).
- [23] B. D. Day, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 719 (1967).
- [24] T. H. R. Skyrme, *Nucl. Phys.* **9**, 615 (1959).
- [25] D. Gogny, P. Pires, and D. R. Turell, [http://dx.doi.org/10.1016/0370-2693\(70\)90552-6](http://dx.doi.org/10.1016/0370-2693(70)90552-6) *Phys. Lett. B* **32**, 591 (1970).
- [26] J. Erler, P. Klüpfel, and P.-G. Reinhard, *J. Phys. G* **38**, 033101 (2011).
- [27] H. M. Sommermann, *Ann. of Phys.* **151**, 163 (1983).
- [28] P. Cejnar, J. Jolie, and R. F. Casten, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2155 (2010).
- [29] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **34**, 1293 (1929).
- [30] J. W. Rayleigh, *Phil. Trans.* **161** (1870).
- [31] W. Ritz, *Journal für die reine und angewandte Mathematik (Crelles Journal)* **1909**, 1 (1909).
- [32] K. T. R. Davies, H. Flocard, S. J. Krieger, and M. S. Weiss, *Nucl. Phys. A* **342**, 111 (1980).
- [33] A. Bohr, B. R. Mottelson, and D. Pines, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.110.936> *Phys. Rev.* **110**, 936 (1958).
- [34] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [35] J.-P. Blaizot and G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems* (MIT Press, 1985).
- [36] J. W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-particle Systems* (Co., Addison-Wesley Pub., 1988) p. 480.
- [37] G. C. Wick, *Phys. Rev.* **80**, 268 (1950).
- [38] J. L. Egido, J. Lessing, V. Martin, and L. M. Robledo, *Nucl. Phys. A* **594**, 70 (1995).
- [39] J. Terasaki, P.-H. Heenen, H. Flocard, and P. Bonche, [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(96\)00036-X](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(96)00036-X) *Nucl. Phys. A* **600**, 371 (1996).

- [40] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, and J. A. Maruhn, <http://dx.doi.org/10.1007/s10050-000-4504-z> Euro. Phys. J. A **8**, 59 (2000).
- [41] T. Duguet, P. Bonche, P.-H. Heenen, and J. Meyer, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.65.014311> Phys. Rev. C **65**, 014311 (2001).
- [42] K. T. R. Davies, M. Baranger, R. M. Tarbutton, and T. T. S. Kuo, Phys. Rev. **177**, 1519 (1969).
- [43] S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, and A. Schwenk, Prog. Part. Nucl. Phys. **65**, 94 (2010).
- [44] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. **75**, 121 (2003).
- [45] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [46] J. C. Slater, Phys. Rev. **81**, 385 (1951).
- [47] L. N. Oliveira, E. K. U. Gross, and W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **60**, 2430 (1988).
- [48] J. Messud, M. Bender, and E. Suraud, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.80.054314> Phys. Rev. C **80**, 054314 (2009).
- [49] R. O. Jones, Rev. Mod. Phys. **61**, 689 (1989).
- [50] D. Vautherin and D. M. Brink, Phys. Rev. C **5**, 626 (1972).
- [51] J. Dechargé and D. Gogny, Phys. Rev. C **21**, 1568 (1980).
- [52] J. W. Negele and D. Vautherin, Phys. Rev. C **5**, 1472 (1972).
- [53] P. Bonche, H. Flocard, P.-H. Heenen, S. J. Weiss, and M. S. Krieger, Nucl. Phys. A **443**, 39 (1985).
- [54] T. Lesinski, M. Bender, K. Bennaceur, T. Duguet, and J. Meyer, Phys. Rev. C **76**, 014312 (2007).
- [55] M. Bender, G. F. Bertsch, and P.-H. Heenen, Phys. Rev. C **73**, 034322 (2006).
- [56] J. W. Negele and D. Vautherin, Nucl. Phys. A **207**, 298 (1973).
- [57] Y. M. Engel, D. M. Brink, K. Goeke, S. J. Krieger, and D. Vautherin, Nucl. Phys. A **249**, 215 (1975).
- [58] B. A. Brown, C. R. Bronk, and P. E. Hodgson, J. Phys. G **10**, 1683 (1984).
- [59] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egido, and L. M. Robledo, Euro. Phys. J. A - Hadrons and Nuclei **17**, 37 (2003).
- [60] T. Duguet, P. Bonche, P.-H. Heenen, and J. Meyer, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.65.014311> Phys. Rev. C **65**, 014311 (2001).

- [61] N. S. Pattabiraman, D. G. Jenkins, M. A. Bentley, R. Wadsworth, G. Lotay, P. J. Woods, and P. V. Isacker, *Phys. Rev. C* **78**, 024301 (2008).
- [62] B. Cederwall, F. G. Moradi, T. Bäck, A. Johnson, J. Blomqvist, E. Clément, G. de France, R. Wadsworth, K. Andgren, K. Lagergren, A. Dijon, G. Jaworski, R. Liotta, C. Qi, B. M. Nyakó, J. Nyberg, M. Palacz, H. Al-Azri, A. Algora, G. de Angelis, A. Ataç, S. Bhattacharyya, T. Brock, J. R. Brown, P. Davies, A. Di Nitto, Z. Dombrádi, A. Gadea, J. Gál, B. Hadinia, F. Johnston-Theasby, P. Joshi, K. Juhász, R. Julin, A. Jungclaus, G. Kalinka, S. O. Kara, A. Khaplanov, J. Kownacki, G. La Rana, S. M. Lenzi, J. Molnár, R. Moro, D. R. Napoli, B. S. N. Singh, A. Persson, F. Recchia, M. Sandzelius, J.-N. Scheurer, G. Sletten, D. Sohler, P.-A. Söderström, M. J. Taylor, J. Timár, J. J. Valiente-Dobón, E. Vardaci, and S. Williams, *Nature* **469**, 68 (2010).
- [63] J. Goldstone, *Il Nuovo Cimento* **19**, 154 (1961).
- [64] K. Goeke and P.-G. Reinhard, *Ann. of Phys.* **124**, 249 (1980).
- [65] D. L. Hill and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **89**, 1102 (1953).
- [66] J. J. Griffin and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **108**, 311 (1957).
- [67] R. Balian and E. Brezin, *Il Nuovo Cimento B Series* **10** **64**, 37 (1969).
- [68] M. Bender, P. Bonche, T. Duguet, and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. C* **69**, 064303 (2004).
- [69] T. R. Rodríguez and J. L. Egidio, *Phys. Rev. C* **81**, 064323 (2010).
- [70] T. R. Rodríguez and J. L. Egidio, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 32 (2007).
- [71] M. Bender, P. Bonche, and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. C* **74**, 024312 (2006).
- [72] M. Bender, T. Duguet, P.-H. Heenen, and D. Lacroix, <http://dx.doi.org/10.1142/S0218301311017600> *Int. J. Mod. Phys. E* **20**, 259 (2011).
- [73] T. Duguet, M. Bender, K. Bennaceur, D. Lacroix, and T. Lesinski, *Phys. Rev. C* **79**, 044320 (2009).
- [74] M. Bender, T. Duguet, and D. Lacroix, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.79.044319> *Phys. Rev. C* **79**, 044319 (2009).
- [75] M. Anguiano, J. L. Egidio, and L. M. Robledo, *Nucl. Phys. A* **696**, 467 (2001).
- [76] K. Hara and S. Iwasaki, *Nucl. Phys. A* **332**, 61 (1979).
- [77] K. Hara, S. Iwasaki, and K. Tanabe, [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(79\)90095-2](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(79)90095-2) *Nucl. Phys. A* **332**, 69 (1979).

- [78] J. L. Egido and P. Ring, *Nucl. Phys. A* **388**, 19 (1982).
- [79] J. L. Egido and P. Ring, *Nucl. Phys. A* **383**, 189 (1982).
- [80] J.-A. Sheikh, E. Lopes, and P. Ring, <http://dx.doi.org/10.1134/1.1358472> *Phys. of Atomic Nuclei* **64**, 477 (2001).
- [81] J.-A. Sheikh and P. Ring, *Nucl. Phys. A* **665**, 71 (2000).
- [82] J. L. Egido and L. M. Robledo, *Nucl. Phys. A* **524**, 65 (1991).
- [83] H. Zdunczuk, J. Dobaczewski, and W. Satuła, *Int. J. Mod. Phys. E* **16**, 377 (2007).
- [84] D. Lacroix, M. Bender, and T. Duguet, <http://dx.doi.org/10.1142/S021830130901438X> *Int. J. Mod. Phys. E* **18**, 2108 (2009).
- [85] J. P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
- [86] M. Bender and T. Duguet, *Int. J. Mod. Phys. E* **16**, 222 (2007).
- [87] G. Hupin, D. Lacroix, and M. Bender, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.84.014309> *Phys. Rev. C* **84**, 014309 (2011).
- [88] H. J. Lipkin, *Ann. of Phys.* **9**, 272 (1960).
- [89] Y. Nogami, *Phys. Rev.* **134**, B313 (1964).
- [90] T. R. Rodríguez, J. L. Egido, and L. M. Robledo, *Phys. Rev. C* **72**, 64303 (2005).
- [91] A. Valor, J. L. Egido, and L. M. Robledo, *Nucl. Phys. A* **665**, 46 (2000).
- [92] A. Valor, J. L. Egido, and L. M. Robledo, *Nucl. Phys. A* **671**, 189 (2000).
- [93] A. Valor, J. L. Egido, and L. M. Robledo, *Phys. Rev. C* **53**, 172 (1996).
- [94] P.-G. Reinhard, W. Nazarewicz, M. Bender, and J. A. Maruhn, *Phys. Rev. C* **53**, 2776 (1996).
- [95] R. W. Richardson and N. Sherman, *Journal of Mathematical Phys.* **6**, 1034 (1965).
- [96] R. W. Richardson, *Phys. Rev.* **141**, 949 (1966).
- [97] K. Dietrich, H. J. Mang, and J. H. Pradal, *Phys. Rev.* **135**, B22 (1964).
- [98] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, R. Kirchner, W. Nazarewicz, and J. Terasaki, *Phys. Rev. C* **76**, 014308 (2007).

- [99] D. Vautherin, *Phys. Rev. C* **7**, 296 (1973).
- [100] P. Bonche, H. Flocard, and P.-H. Heenen, *Comput. Phys. Commun.* **171**, 49 (2005).
- [101] R. Balian, H. Flocard, and M. Vénéroni, *Phys. Rep.* **317**, 251 (1999).
- [102] D. J. Rowe, *Nucl. Phys. A* **691**, 691 (2001).
- [103] N. Sandulescu and G. F. Bertsch, *Phys. Rev. C* **78**, 064318 (2008).
- [104] N. Sandulescu, B. Errea, and J. Dukelsky, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.80.044335> *Phys. Rev. C* **80**, 044335 (2009).
- [105] D. J. Rowe, T. Song, and H. Chen, *Phys. Rev. C* **44**, R598 (1991).
- [106] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (Dover Publications, 1999) p. 1152.
- [107] J. F. Bonnans, J. C. Gilbert, C. Lemaréchal, and C. A. Sagastizábal, *Numerical Optimization : Theoretical and Practical Aspects* (Springer-Verlag, 2003) p. 437.
- [108] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications Inc., 2003) p. 640.
- [109] J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B* **45**, 13244 (1992).
- [110] A. M. K. Müller, *Phys. Lett. A* **105**, 446 (1984).
- [111] G. Csányi and T. A. Arias, *Phys. Rev. B* **61**, 7348 (2000).
- [112] G. Csányi, S. Goedecker, and T. A. Arias, *Phys. Rev. A* **65**, 032510 (2002).
- [113] G. Ortiz and P. Ballone, *Phys. Rev. B* **56**, 9970 (1997).
- [114] N. N. Lathiotakis, N. Helbig, and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. B* **75**, 195120 (2007).
- [115] G. Sierra, J. Dukelsky, G. G. Dussel, J. von Delft, and F. Braun, *Phys. Rev. B* **61**, R11890 (2000).
- [116] G. Hupin and D. Lacroix, *Phys. Rev. C* **83**, 024317 (2011).
- [117] G. Colò, H. Sagawa, and P. Bortignon, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.82.064307> *Phys. Rev. C* **82**, 064307 (2010).
- [118] J. Erler, P. Klüpfel, and P.-G. Reinhard, *Phys. Rev. C* **82**, 044307 (2010).
- [119] J. Terasaki and J. Engel, *Phys. Rev. C* **82**, 034326 (2010).

- [120] T. Papenbrock and A. Bhattacharyya, *Phys. Rev. C* **75**, 014304 (2007).
- [121] M. G. Bertolli and T. Papenbrock, *Phys. Rev. C* **78**, 064310 (2008).
- [122] A. Kamlah, *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **216**, 52 (1968).
- [123] D. C. Zheng, D. W. L. Sprung, and H. Flocard, *Phys. Rev. C* **46**, 1355 (1992).
- [124] J. Dukelsky, S. Pittel, and G. Sierra, <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.76.643> *Rev. Mod. Phys.* **76**, 643 (2004).
- [125] S. Rombouts, D. Van Neck, and J. Dukelsky, *Phys. Rev. C* **69**, 061303 (2004).
- [126] J. Dukelsky, C. Esebbag, and S. Pittel, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.062501> *Phys. Rev. Lett.* **88**, 62501 (2002).
- [127] R. Balian, *American Journal of Phys.* **67**, 1078 (1999).
- [128] E. A. Yuzbashyan, A. A. Baytin, and B. L. Altshuler, *Phys. Rev. B* **68**, 214509 (2003).
- [129] F. Braun and J. von Delft, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4712 (1998).
- [130] J. Dukelsky and G. Sierra, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 172 (1999).
- [131] R. A. Smith and V. Ambegaokar, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4962 (1996).
- [132] M. L. Mehta, *Random matrices* (Academic Press, 2004).

Remerciements

Je souhaite adresser sur cette page mes sincères remerciements à tous ceux et celles qui ont contribué à l'aboutissement de ce travail.

Je remercie S. Gales de m'avoir accueilli au sein du Ganil, me permettant de mener à bien le travail présenté dans ce manuscrit.

Je tiens à remercier tout particulièrement les membres du Jury, la présidente, Francesca Gulminelli, les rapporteurs, Michael Bender et Philippe Chomaz ainsi que George F. Bertsch qui ont eu la gentillesse d'examiner mon travail et de me proposer commentaires et remarques très enrichissantes.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Denis Lacroix, mon directeur de thèse, qui m'a accompagné et encadré lors de ce travail de recherche. J'ai beaucoup apprécié son ouverture d'esprit, sa volonté de comprendre et sa passion de faire de la recherche, toutes ses qualités qui font de lui un grand chercheur. Je lui suis très reconnaissant pour son encadrement, sa bonne humeur et son soutien ainsi que pour l'étendue des connaissances qu'il m'a transmises. Merci Denis.

Je remercie les différentes personnes avec lesquelles j'ai eu la chance de travailler. En particulier G. G. Adamian et N. V. Antonenko qui m'ont fait découvrir pour ma première conférence la Russie et sa capitale Moscou. Un grand merci à Nicu dont les discussions et l'aide m'ont été précieuses. De même que je remercie Michael et Thomas pour leurs échanges enflammés qui ont énormément contribué à motiver et à réaliser ce travail. Merci également à mes camarades Benoit, Jérémie, Jérémie, Kouhei et Veerle avec qui j'ai pu partager le quotidien d'une collaboration. Je remercie Navin pour son immuable passion de la recherche, son sens de l'enseignement et de la transmission du savoir.

Un grand merci à mes nombreux collègues expérimentateurs, en pensant aux nombreuses questions qu'ils nous posent et aux problèmes qu'ils soulèvent, nous apportant ainsi toujours plus de motivation dans notre travail.

Une grande pensée pour ceux avec qui j'ai eu la chance de partager mon bureau : Antoine, Bulent, Gérard et Predrag. Je remercie tous mes collègues du Ganil avec qui j'ai eu la chance de partager de très bons moments : Abdou, Beyhan, Christelle, David, Emmanuel, Eric, Fanny, François, Jean-Charles, Jean-Pierre, John, Geoff, Gilles, Héloïse, Hervé, Manssour, Maurice, Maurycy, Marie-Geneviève, Marek, Olivier, Pierre et Piet. Un grand merci à Aurore, Alexandre, Dorothée, Carole, Guilan, Jo, Kasia, Ketel, Kouhei, Lucia, Marco, Marlène, Mark, Matt, Nancy, Olivier, Thomas, Pang, Pu, Xavier et Yannen. Ainsi qu'à tout ceux avec qui j'ai eu l'occasion de partager quelques mots et du café, de Saclay à Bordeaux et Strasbourg.

Je souhaiterais également remercier Emilie, Sabrina, Sophie, Véronique et Virginie pour leur aide dans la vie au quotidien d'un thésard.

Avec une grande pensée à une stagiaire de passage qui s'est faite offrir des cafés par un thésard en pleine rédaction.

Merci à ma famille qui, au cours de ces années, m'a encouragé et épaulé.

Surtout merci à mes amis, à Régis, à mon meilleur ami Pierre et à sa famille pour toute l'aide et le soutien qu'ils m'ont apportés. A vous tous, lecteurs, collègues et amis, famille sans qui rien ne peut être entrepris, merci.

Guillaume

Résumé :

L'utilisation conjointe d'une théorie où l'énergie est écrite comme une fonctionnelle de la densité et du mélange de configuration, permet de décrire précisément les propriétés des états nucléaires. Les contributions spurieuses observées récemment ont mis en évidence la nécessité de corriger les énergies et soulignent le manque de fondements théoriques associé aux brisures et aux restaurations de symétries dans une approche fonctionnelle. Dans cette thèse, des théories alternatives permettant de briser puis de restaurer la conservation du nombre de particules pour décrire les corrélations d'appariement, ont été proposées. Ainsi, l'énergie peut s'écrire comme une fonctionnelle d'un état de vide de quasi-particule projeté et peut être reliée à celle obtenue à l'aide du mélange de configurations. Cette approche est appliquée soit pour faire des projections après ou avant l'application du principe variationnel et montre une très grande flexibilité par rapport aux méthodes standards. En particulier, il est possible d'utiliser des interactions effectives très générales. Une application à la chaîne isotopique des Kryptons démontre à la fois la faisabilité et l'amélioration du traitement de l'appariement dans les noyaux proches de la magie. Dans un second temps, une théorie où l'énergie est directement écrite comme une fonction des nombres d'occupation et des orbitales naturelles, est proposée. Cette nouvelle fonctionnelle est validée dans le cas d'un Hamiltonien de pairing exactement soluble. Le pouvoir prédictif de cette approche est démontré dans des conditions diverses de l'intensité de l'appariement, des espacements des énergies à un corps et de nombre de particules.

Density functional approaches for pairing in finite size systems

Abstract :

The combination of functional theory where the energy is written as a functional of the density, and the configuration mixing method, provides an efficient description of nuclear ground and excited state properties. The specific pathologies that have been recently observed, show the lack of a clear underlying justification associated to the breaking and the restoration of symmetries within density functional theory. This thesis focuses on alternative treatments of pairing correlations in finite many body systems that consider the breaking and the restoration of the particle number conservation. The energy is written as a functional of a projected quasi-particle vacuum and can be linked to the one obtained within the configuration mixing framework. This approach has been applied to make the projection either before or after the application of the variational principle. It is more flexible than the usual configuration mixing method since it can handle more general effective interactions than the latter. The application to the Krypton isotopes shows the feasibility and the efficiency of the method to describe pairing near closed shell nuclei. Following a parallel path, a theory where the energy is written as a functional of the occupation number and natural orbitals is proposed. The new functional is benchmarked in an exactly solvable model, the pairing Hamiltonian. The efficiency and the applicability of the new theory have been tested for various pairing strengths, single particle energy spectra and numbers of particles.

Mots clés : Fonctionnelles densité – Corrélations d'appariement (Physique Nucléaire) – Symétrie brisée (Physique) – Physique Nucléaire

Discipline : Constituants élémentaires et physique théorique

Grand Accélérateur National d'Ions Lourds

Bd Henri Becquerel- BP 55027 - 14076 CAEN Cedex 05